BERÜCKSICHTIGUNG VON HARD CORE-KORRELATIONEN IM OPTISCHEN FISCHGRÄTENMODELL

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von

Gerhard Spitz
aus Ulm

1984

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41546518_0012

BERÜCKSICHTIGUNG VON HARD CORE-KORRELATIONEN IM OPTISCHEN FISCHGRÄTENMODELL

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von

Gerhard Spitz
aus Ulm

1984

Tag der mündlichen Prüfung:	21. 5. 84
Dekan:	Prof. K.-H. Herrmann
1. Berichterstatter:	Prof. E. Schmid
2. Berichterstatter:	Prof. K. Wildermuth
3. Berichterstatter:	Prof. H. Fiedeldey

Für meine Eltern

Abstract

SPITZ, GERHARD

BERÜCKSICHTIGUNG VON HARD CORE-KORRELATIONEN IM OPTISCHEN FISCHGRÄTENMODELL

Das optische Fischgrätenmodell erlaubt es, effektive Wechselwirkungen zwischen zusammengesetzten Atomkernen unter genäherter Behandlung der Antisymmetrisierung zwischen allen beteiligten Nukleonen aufzustellen. In dieser Arbeit wird eine Erweiterung des Modells untersucht, bei der auch kurzreichweitige Korrelationen zwischen den beteiligten Nukleonen, insbesondere auch solche vom hard core-Typ, in den Formalismus eingebracht werden. Die Gesamtwechselwirkung enthält einen lokalen Anteil, der sich aus einem Faltungspotential und einem zusätzlichen repulsiven Term, der die durch die Korrelationen erzeugte kinetische Energie wiedergibt, zusammensetzt. Ein nichtlokaler Anteil der Wechselwirkung kann aus dem lokalen Anteil und den Eigenzuständen und Eigenwerten eines nichtlokalen effektiven Zwei-Körper-Operators berechnet werden. Der lokale Anteil wird mit Fitting-Parametern versehen, um die experimentellen Streudaten zu reproduzieren. Der Formalismus wird ausgeführt, diskutiert und in den Beispielen n-α und α-α angewandt. Es ergibt sich nahe des Ursprungs eine insgesamt etwas geringere Attraktion als mit dem ursprünglichen optischen Fischgräten-modell. Der Unterschied reicht aber vermutlich nicht aus, um in Drei- oder Mehr-Körper-Problemen ohne Einbeziehung effektiver Drei-Körper-Kräfte zu einer Sättigung zu gelangen.

INHALT

I. Einleitung 1

II. Theoretische Grundlagen 5

1. Die Bewegungsgleichung des Resonating Group-Modells 5
2. Grundgedanken des optischen Fischgräten-modells 8
3. Einbau von Korrelationen in das optische Fischgrätenmodell 10
4. Zusammenhang mit dem Saito-Modell 17
5. Schwierigkeiten bei der Definition des Direktpotentials 20
6. Verallgemeinerung auf Drei-Körper-Rechnungen 25

III. Durchgeführte Untersuchungen und Ergebnisse 27

1. Wahl der in den Ansatz eingehenden Größen 28
   a) Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung 28
   b) Wahl der Korrelationsfunktion 31
   c) Wahl des α-Grundzustands 35
2. Direktpotential 40
   a) allgemeine Eigenschaften 40
   b) Abhängigkeit des Direktpotentials von Details der Korrelationsfunktion und vom Cluster-Grundzustand 44
   c) Abhängigkeit des Direktpotentials vom hard core-Radius 48
   d) Berücksichtigung der even-odd-Abhängigkeit des Nukleon-Nukleon-Potentials 51

--- Fortsetzung III. ---

3. Der korrelierte Normkern 54
a) Allgemeine Bemerkungen 54
b) α-α-Fall 56
c) n-α-Fall 61
d) Schlußfolgerungen aus beiden Beispielen 66
4. Gesamtwechselwirkung; Vergleich mit dem Experiment 69
a) Definition der Fitting-Parameter 69
b) Das α-α-Problem 70
c) Das n-α-Problem 80

IV. Zusammenfassung und Ausblick 85

Anhang

I. Einfluß kurzreichweitiger Anteile in der Nukleon-Nukleon-Kraft auf die Struktur der Resonating Group-Bewegungsgleichung 88
II. Anwendung der Quasi-Zufallszahlen-Methode von Richtmyer und Haselgrove auf das vorliegende Problem 91
III. Begründung für das Auftreten negativer Eigenwerte beim korrelierten Normkern 96
IV. Reichweitenkorrektur für das optische Fischgrätenmodell 98

Literaturangaben 104

I. Einleitung

Es gibt verschiedene Ausgangspunkte, um die Wechselwirkung zwischen leichten Atomkernen zu beschreiben.

Zum einen kann man ein rein phänomenologisches Potential aufstellen, das die experimentellen Streudaten und gegebenenfalls auch Bindungsenergien richtig wiedergibt. Man gibt dabei für gewöhnlich mehr oder minder willkürlich eine Potentialform vor, die genügend freie Parameter enthält, um die theoretisch berechneten Streuquerschnitte und Bindungsenergien mit den experimentellen in Einklang zu bringen. Ein bekanntes Beispiel für solch eine phänomenologische Wechselwirkung ist das Ali-Bodmer-Potential /1/ für die α-α-Streuung. Behandelt man schwerere Systeme mit solch einem Ansatz, ist schon bei geringen Energien ein Imaginärteil im Potential nötig, um Absorption aus dem elastischen Kanal beschreiben zu können. Bei leichten Systemen sind die Schwellenenergien für inelastische Prozesse häufig so groß, daß in einem ziemlich weiten Energiebereich kein Imaginärteil auftritt. Im folgenden wollen wir alle phänomenologisch an die experimentellen Daten angepaßten Potentiale als optische Potentiale bezeichnen, gleichgültig ob sie einen Imaginärteil enthalten oder nicht.

Physikalisch befriedigender als ein rein phänomenologischer Ansatz ist der Versuch, eine effektive Wechselwirkung zwischen den beteiligten Kernen auf der Basis einer vorgegebenen Nukleon-Nukleon-Kraft abzuleiten. Im einfachsten Fall faltet man dazu die Nukleon-Nukleon-Kraft mit den Nukleonendichten der beteiligten Kerne.

Besonders erfolgreich für die Beschreibung der Wechselwirkung zwischen leichten Atomkernen ist das Resonating Group-Modell (RGM) /2,3/. Es berücksichtigt vollständig die Antisymmetrisierung zwischen allen beteiligten Nukleonen. Durch Erweitern der Funktionenbasis für den Ansatz der Gesamtwellenfunktion kann man es auch dazu verwenden, um Drei-Körper-Probleme oder inelastische Prozesse auf einer mikroskopischen Grundlage zu untersuchen. Problematisch bei allen effektiven Wechselwirkungen auf mikroskopischer Basis ist, daß sie normalerweise

wegen der unvermeidlichen Vernachlässigungen im Ansatz die experimentellen Ergebnisse nicht genau wiedergeben. Als Ausweg bietet es sich an, Modifikationen an der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung oder an den inneren Kern-Wellenfunktionen vorzunehmen, für die eine physikalisch voll befriedigende Begründung jedoch oft nicht gegeben werden kann (z.B. /4/).

In den letzten Jahren wird daher zunehmend versucht, Ansätze für phänomenologische Wechselwirkungen zu finden, die in sich bereits möglichst viel aus der mikroskopischen Theorie gewonnene Information bergen. Besonderer Wert wurde auf die Einbringung des Pauli-Prinzips in optische Potentiale gelegt. Untersuchungen im Rahmen des Resonating Group-Modells zeigen, daß durch das Pauli-Prinzip in den allermeisten Streusystemen Zustände in der Relativbewegung auftreten, die verboten sind, wenn man die Grundzustände der Kerne nach dem Oszillator-Schalenmodell wählt. Da die Form der Zustände nicht explizit vom verwendeten Nukleon-Nukleon-Potential abhängt, schlug Saito vor, dem Pauli-Prinzip dadurch Rechnung zu tragen, daß man eine phänomenologische Wechselwirkung zwischen den beteiligten Kernen annimmt und als Zusatzbedingung für die Relativwellenfunktion fordert, daß sie orthogonal zu den verbotenen Zuständen sei /5/. Die verbotenen Zustände sind Eigenzustände eines nichtlokalen Operators, des sogenannten Normkerns, zum Eigenwert 1. In den meisten Streusystemen gibt es aber auch eine Reihe von Eigenzuständen mit Werten zwischen 0 und 1, für die das Pauli-Prinzip ebenfalls eine Rolle spielt. Das optische Fischgrätenmodell macht den Versuch, die Antisymmetrisierungseffekte für beide Arten von Zuständen auf der gleichen Grundlage zu behandeln; für die völlig verbotenen Zustände ist es identisch mit dem Saito-Modell /6,7/.

Ein weiterer interessanter Punkt bei der Aufstellung von effektiven Wechselwirkungen zwischen leichten Kernen sind die kurzreichweitigen Nukleon-Nukleon-Korrelationen, die durch den stark repulsiven Charakter der Nukleon-Nukleon-Kraft bei kurzen Abständen hervorgerufen werden. In das Resonating Group-Modell kann man sie durch Einführung einer Korrelationsfunktion, etwa vom Jastrow-Typ, in den Ansatz für die Gesamt-

wellenfunktion einbauen. Wegen der damit verbundenen umfangreichen numerischen Integrationen wurde diese Methode aber nur einmal in aller Strenge /8/ und einige Male in Näherungsrechnungen verwendet /9,10/. Die Verwendung von effektiven Nukleon-Nukleon-Kräften aus der Kernmaterietheorie, die bereits implizit die Nukleon-Nukleon-Korrelationen enthalten, führt bei leichten Kernen nicht unbedingt zu guten Ergebnissen, da diese Wechselwirkungen die Nukleon-Nukleon-Streudaten nicht richtig wiedergeben (vgl. z.B. /11/).

In der Resonating Group-Methode arbeitet man deshalb häufig mit Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen ohne Repulsion. Die inneren Wellenfunktionen der beteiligten Kerne wählt man dabei so, daß die jeweiligen Kernradien richtig wiedergegeben werden. Vom Standpunkt des Ritz'schen Variationsprinzips sind diese inneren Wellenfunktionen dann normalerweise sehr schlechte Näherungen für die Eigenzustände, da das Energieminimum für das vorausgesetzte Nukleon-Nukleon-Potential bei deutlich geringeren Kernradien läge. Deshalb gibt es mit diesem Ansatz bei Mehr-Kanal-Rechnungen /12/ und Drei-Körper-Problemen /13,14/ in der Regel zu hohe Bindungsenergien, auch wenn in Zwei-Körper-Ein-Kanal-Rechnungen gute Resultate erzielt werden /15/.

In einer Zusammenarbeit zwischen Physikern aus Nagoya, Sapporo und Tübingen wurde 1982 eine Methode entwickelt, die kurzreichweitigen Nukleon-Nukleon-Korrelationen durch ein effektives Potential auf der Basis des optischen Fischgrätenmodells zu beschreiben /16/. Die Berücksichtigung der Korrelationen führt gegenüber dem ursprünglichen optischen Fischgrätenmodell hauptsächlich zu einem weiteren repulsiven Beitrag in der Gesamtwechselwirkung.

Als erste Anwendung des Verfahrens wurden die Systeme ${}^{5}_{\Lambda}\mathrm{He}$ und ${}^{6}_{\Lambda\Lambda}\mathrm{He}$ untersucht. Sie wurden dabei als aus je einem α-Teilchen und einem bzw. zwei Λ-Teilchen zusammengesetzt angenommen. Mit den Untersuchungen wurde die Stärke der Drei-Körper-Kräfte, die aus den Korrelationen folgen, studiert. Da das Λ-Teilchen als von den Nukleonen unterscheidbar angesehen wurde, traten Antisymmetrisierungseffekte in diesen

Rechnungen nicht auf /17/.

In der vorliegenden Arbeit soll an den Beispielen n-α und α-α erstmals die aus dem Ansatz folgende Gesamtwechselwirkung an Systemen mit Antisymmetrisierung untersucht werden.

II. Theoretische Grundlagen

Um die Grundgedanken, die zum Ansatz für die effektive Wechselwirkung beim optischen Fischgrätenmodell mit Nukleon-Nukleon-Korrelationen führen, nachvollziehen zu können, muß man sich zunächst mit der Herleitung des ursprünglichen optischen Fischgrätenmodells aus der Resonating Group-Bewegungsgleichung auseinandersetzen. Deshalb werden in den nächsten zwei Kapiteln zunächst kurz die Resonating Group-Methode und das optische Fischgrätenmodell besprochen.

1. Die Bewegungsgleichung des Resonating Group-Modells

Die Resonating Group-Methode versucht, die Viel-Nukleonen-Schrödingergleichung durch Projektion in einen Teilraum mit weniger Freiheitsgraden zu lösen.

Formal kann man dies durch die Gleichung

$$\langle \delta\Psi | (H - E) | \Psi \rangle = 0 \qquad \text{(II-1)}$$

ausdrücken. Läßt man für δ alle möglichen Viel-Nukleonen-Zustände zu, so ist (II-1) vollständig äquivalent zur gewöhnlichen Schrödingergleichung /3/.

Im einfachsten Fall betrachtet die Resonating Group-Methode die Wechselwirkung zwischen zwei Atomkernen in einem Energiebereich, wo nur der elastische Kanal offen ist, und macht für ψ den Ansatz

$$\psi = \mathcal{A}\{\Phi_1 \Phi_2 \chi\} \quad . \qquad \text{(II-2)}$$

Hierbei sind Φ_1 und Φ_2 die Grundzustände der beiden Atomkerne, χ ist eine Funktion, die von der Relativkoordinate zwischen den Schwerpunkten der beiden Kerne abhängt. Sie wird normalerweise als Relativwellenfunktion zwischen den beiden Atomkernen inter-

pretiert. $\mathcal{A}$ ist der Antisymmetrisator zwischen allen beteiligten Nukleonen.

Wir wollen uns im folgenden auf diesen einfachsten Fall beschränken, der aber normalerweise bei Energien knapp unterhalb der Schwelle für den energiegünstigsten inelastischen Prozeß aufhört, ein guter Ansatz für die Gesamtwellenfunktion zu sein. In einigen Streusystemen können auch bei niedrigeren Energien Viel-Nukleonen-Resonanzen auftreten, die sich durch den Ansatz (II-2) nicht gut beschreiben lassen. Ein Atomkern, der nur über einen vorgegebenen Grundzustand und eine Relativwellenfunktion in den Ansatz für die Gesamtwellenfunktion eingeht, wird in der Resonating Group-Theorie häufig als "Cluster" bezeichnet.

Aus rechentechnischen Gründen verwendet man oft in der Resonating Group-Methode für die Cluster Grundzustände des Oszillatorschalenmodells mit jeweils gleichen Weiteparametern.
Diese Vereinfachung werden wir im folgenden kurz als Oszillator-Grenzfall bezeichnen.

Der Ansatz (II-2) führt zur Bewegungsgleichung

$$\langle \phi_1\phi_2\, \delta\chi \,|\, \mathcal{A}\,(H-E)\,\mathcal{A} \,|\, \phi_1\phi_2\, \chi\rangle = 0 \quad . \tag{II-3}$$

Der Hamilton-Operator H ist in allen Teilchen-Koordinaten symmetrisch und vertauscht deshalb mit dem Antisymmetrisator $\mathcal{A}$. Deshalb kann man ohne Schaden eines der beiden $\mathcal{A}$ in (II-3) weglassen. Außerdem wollen wir die Kern-Grundzustände schon als antisymmetrisch annehmen und können daher $\mathcal{A}$ durch den externen Antisymmetrisator $\mathcal{A}_{ext}$ ersetzen, der nur Vertauschungen zwischen den beiden Kernen enthält. Normalerweise wird $\mathcal{A}_{ext}$ so normiert, daß man ihn aufspalten kann gemäß

$$\mathcal{A}_{ext} = 1 - \mathcal{A}'_{ext} \quad , \tag{II-4}$$

wobei $\mathcal{A}'_{ext}$ ausschließlich Austausch-Terme enthält. Gl. (II-3) schreibt sich dann als

$$\begin{aligned} &\langle \phi_1\phi_2\, \delta\chi \,|\, (H-E) \,|\, \phi_1\phi_2\, \chi\rangle = \\ &= \langle \phi_1\phi_2\, \delta\chi \,|\, \mathcal{A}'_{ext}\,(H-E) \,|\, \phi_1\phi_2\, \chi\rangle \quad . \end{aligned} \tag{II-5}$$

Zu einer effektiven Wechselwirkung kommt man, wenn man die Faltung über alle internen Nukleon-Koordinaten ausführt. Als Bewegungsgleichung für die Relativ-Wellenfunktion χ ergibt sich

$$(T_r + V_f - E_r)\,\chi(\vec{R}) = \int d^3R' \,(K_H(\vec{R}', \vec{R}'') - E_r\, K(\vec{R}', \vec{R}''))\,\chi(\vec{R}'') \quad . \tag{II-6}$$

Hierbei symbolisiert T_r den Operator für die Bewegungsenergie in der Relativbewegung zwischen den beiden als punktförmig gedachten Kernen, E_r die Energie in der Relativbewegung. V_f entsteht durch die Faltung des Nukleon-Nukleon-Potentials über die Nukleonendichten in den beiden Kernen. Ohne die rechte Seite entspricht (II-6) also einer Bewegungsgleichung nach dem einfachen Faltungsmodell ohne Antisymmetrisierung. Die Operatoren auf der rechten Seite sind definiert durch

$$K(\vec{R}', \vec{R}'') = \langle \Phi_1\Phi_2\,\vec{R}' \,|\, \mathcal{A}'_{ext} \,|\, \Phi_1\Phi_2\,\vec{R}'' \rangle \tag{II-7}$$

und

$$K_H(\vec{R}', \vec{R}'') = \langle \Phi_1\Phi_2\,\vec{R}' \,|\, \mathcal{A}'_{ext}\,(H - E_{int}) \,|\, \Phi_1\Phi_2\,\vec{R}'' \rangle \quad . \tag{II-8}$$

Dabei symbolisiert E_{int} den Erwartungswert für die innere Energie der beiden Kerne, den man mit dem Hamilton-Operator für das Gesamtsystem berechnet.

Die Gesamtwechselwirkung nach dem Resonating Group-Modell ist somit nichtlokal. Wegen der Anwesenheit von $\mathcal{A}'_{ext}$ in den Definitionen (II-7) und (II-8) sind beide nichtlokale Operatoren jedoch kompakt und können deshalb in kovergenter Weise nach einem vollständigen Orthonormalsystem für alle quadratintegrablen Zustände der Relativbewegung entwickelt werden. Sie sind außerdem hermitesch, so daß ihre Eigenzustände ein solches Orthonormalsystem bilden.

Im folgenden werden wir häufig mit Eigenzuständen des Operators K arbeiten, die durch die Gleichung

$$K \,|\, u_i \rangle = \eta_i \,|\, u_i \rangle \tag{II-9}$$

definiert sind.

K wollen wir als Normkern bezeichnen. Die Schreibweisen η_i und u_i für Eigenwerte und Eigenzustände des Normkerns wollen wir beibehalten, mit der Numerierungskonvention

$$|\eta_i| \geq |\eta_j| \qquad i < j \quad . \tag{II-9a}$$

2. Grundgedanken des optischen Fischgrätenmodells

Das optische Fischgrätenmodell wurde bei einer Untersuchung der Struktur der Resonating Group-Bewegungsgleichung (II-6) entwickelt /6/.

Dazu wurde der Operator K_H, der auf der rechten Seite von (II-6) auftritt, in der Basis der Normkerneigenzustände u_i dargestellt und aufgespalten gemäß

$$K_H = \sum_{i,j} |u_i\rangle \, M_{ij} \langle u_i| \, (T_r + V_f) \, |u_j\rangle \langle u_j| + V_{res} \quad ,$$

$$M_{ij} = \begin{cases} \eta_i & i \leq j \\ \eta_j & i > j \end{cases} \quad . \tag{II-10}$$

Die M_{ij} bilden die sogenannte Fischgrätenmatrix:

$$M = \begin{pmatrix} \eta_1 & \eta_1 & \eta_1 & \eta_1 & \eta_1 & \cdots \\ \eta_1 & \eta_2 & \eta_2 & \eta_2 & \eta_2 & \cdots \\ \eta_1 & \eta_2 & \eta_3 & \eta_3 & \eta_3 & \cdots \\ \eta_1 & \eta_2 & \eta_3 & \eta_4 & \eta_4 & \cdots \\ \eta_1 & \eta_2 & \eta_3 & \eta_4 & \eta_5 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \end{pmatrix} \quad . \tag{II-11}$$

V_{res} wird als der Restterm der nichtlokalen Wechselwirkung bezeichnet, die erste Doppelsumme in (II-10) dagegen als Hauptteil.

Dem optischen Fischgrätenmodell zugrunde liegt die Behauptung, daß die durch die Antisymmetrisierung folgende Struktur der nichtlokalen Wechselwirkung bereits im wesentlichen durch den Hauptteil wiedergegeben wird und daß V_{res} als Korrektur höherer Ordnung am Hauptteil angesehen werden kann /6/.

Die Behauptung läßt sich stützen durch die folgenden Tatsachen:

1. Alle Beiträge der kinetischen Energie zur nichtlokalen Wechselwirkung sind bereits im Hauptteil enthalten /18/.
2. Der Restterm kommt nur zustande durch innere Anregungen der Kerne, die vom Nukleon-Nukleon-Potential vermittelt werden. Beim Oszillator-Grenzfall und Kernen mit abgeschlossenen Schalen bedeutet dies, daß mindestens ein Oszillatorquant aus der Relativbewegung in eine innere Anregung transferiert werden muß. Ein sehr langreichweitiges Wigner-Potential, das auf alle Nukleonen die gleiche Kraft ausübt, hat einen verschwindenden Restterm in der Resonating Group-Wechselwirkung.
3. Numerische Untersuchungen deuten darauf hin, daß der Restterm in der Basis der Normkern-Eigenzustände nahezu Fischgrätenstruktur (vgl. dazu (II-11)) ähnlich dem Hauptteil aufweist /6/.

In der Fischgräten-Schreibweise lautet die Resonating Group-Bewegungsgleichung (II-6):

$$(T_r + V_f - E_r)\,|\chi\rangle = \sum_{i,j} |u_i\rangle\, M_{ij} \langle u_i|\,(T_r + V_f - E_r)\,|u_j\rangle \times \times \langle u_j|\chi\rangle + V_{res}|\chi\rangle \quad . \tag{II-12}$$

Das optische Fischgrätenmodell erhält man, wenn man den Restterm wegläßt und den dadurch gemachten Fehler kompensiert, indem man V_f durch ein optisches Potential V_{opt} ersetzt, das genügend flexibel ist, um an die experimentell gemessenen Streuphasen

angepaßt zu werden:

$$(T_r + V_{opt} - E_r)|\chi> = \sum_{i,j} |u_i> M_{ij} <u_i|(T_r + V_{opt} - E_r)|u_j> \times$$
$$\times <u_j|\chi> \quad . \qquad \text{(II-13)}$$

Zwar ist die Gesamtwechselwirkung im optischen Fischgrätenmodell genau wie im Resonating Group-Modell nichtlokal, doch ist die Nichtlokalität jetzt allein durch V_{opt} und die Normkern-Eigenzustände u_i bestimmt und nicht mehr von einem mikroskopischen Nukleon-Nukleon-Potential abhängig. Hinzu kommt, daß die Normkern-Eigenzustände im Oszillator-Grenzfall sich mit Hilfe der Gruppe SU_3 klassifizieren lassen, so daß ihre Berechnung auch in komplizierteren Systemen mit Hilfe der Gruppentheorie algebraisch durchgeführt werden kann /19/.

Untersuchungen an den Systemen n-α und α-α ergaben, daß die durch das optische Fischgrätenmodell berechneten Streuphasen nicht nur sehr gut an die der Resonating Group-Theorie angepaßt werden können, sondern daß in diesem Fall die Relativwellenfunktionen χ mit den Resonating Group-Wellenfunktionen nahezu übereinstimmen /20, 21/. (Bei diesem Vergleich muß man allerdings Nicht-Eindeutigkeiten bei der Bestimmung von χ durch die im nächsten Kapitel beschriebene Transformation der Gleichung beseitigen.) Man kann das optische Fischgrätenmodell also auch als Inversionsmodell zum Resonating Group-Modell ansehen, das bei Anpassung an die Streuphasen auch die Wellenfunktionen der Resonating Group-Methode reproduziert /22/.

3. Einbau von Korrelationen in das optische Fischgrätenmodell

Um im optischen Fischgrätenmodell Nukleon-Nukleon-Korrelationen zu berücksichtigen, untersucht man zunächst eine Resonating Group-Bewegungsgleichung, wo der Ansatz für die Wellenfunktion durch einen Korrelationsfaktor F ergänzt wird.

Als neuer Ansatz für die Gesamtwellenfunktion ergibt sich

$$\Psi = \mathcal{A}\{F\,\Phi_1\Phi_2\chi\} \quad . \tag{II-14}$$

Der Korrelationsfaktor F soll die kurzreichweitigen Nukleon-Nukleon-Korrelationen zwischen den Nukleonen der beiden Ausgangskerne berücksichtigen, Korrelationen innerhalb eines einzelnen Kerns müssen bereits bei der Wahl der Grundzustandswellenfunktion berücksichtigt werden. Im einfachsten Fall ist F eine Korrelationsfunktion vom Jastrow-Typ,

$$F = \prod_{i\epsilon\Phi_1, j\epsilon\Phi_2} f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad . \tag{II-15}$$

Als Bewegungsgleichung nach dem Resonating Group-Modell erhalten wir

$$\langle \Phi_1\Phi_2\,\delta\chi\,|\,F\,\mathcal{A}\,(H-E)\,\mathcal{A}\,F\,|\,\Phi_1\Phi_2\,\chi\rangle = 0 \quad , \tag{II-16}$$

wobei wir den Korrelationsfaktor als Operator ansehen.

Mit denselben Umformungen wie in Kapitel II.1 kommen wir auf

$$\begin{aligned}&\langle \Phi_1\Phi_2\,\delta\chi\,|\,F\,(H-E)\,F\,|\,\Phi_1\Phi_2\,\chi\rangle = \\ &= \langle \Phi_1\Phi_2\,\delta\chi\,|\,F\,\mathcal{A}'_{ext}\,(H-E)\,F\,|\,\Phi_1\Phi_2\,\chi\rangle \quad .\end{aligned} \tag{II-16a}$$

Wir wollen nun zu einer effektiven Wechselwirkung kommen und dazu zunächst die linke Seite von Gl. (II-16a) untersuchen (nach /23/).

Unser Hamilton-Operator H für das Gesamtsystem läßt sich schreiben als

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{R}} - \sum_k \frac{\hbar^2}{2\mu_k}\Delta_{\vec{\rho}_k} + \sum_{i<j} v_{ij} \quad . \tag{II-17}$$

Hierbei symbolisieren die $\vec{\rho}_k$ Jacoby-Koordinaten für die Beschreibung der Lage der Nukleonen relativ zu den Kern-Schwerpunkten, $\vec{R}$ den Abstandsvektor der beiden Kern-Schwerpunkte; die v_{ij} sind die Wechselwirkungspotentiale der einzelnen Nukleonenpaare untereinander.

Wir untersuchen zunächst den Beitrag von $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{R}}$. Es gilt

$$F\,\Delta_{\vec{R}}\,F = F\,(\Delta_{\vec{R}}F) + 2F\,(\nabla_{\vec{R}}F)\nabla_{\vec{R}} + F^2\Delta_{\vec{R}} =$$
$$= \frac{1}{2}(\Delta_{\vec{R}}F^2) - (\nabla_{\vec{R}}F)^2 + (\nabla_{\vec{R}}F^2)\nabla_{\vec{R}} + F^2\Delta_{\vec{R}} \quad . \qquad \text{(II-18)}$$

In ähnlicher Weise behandeln wir den zweiten Term in (II-17), ϕ steht dabei für ϕ_1 oder ϕ_2 :

$$\phi F\,\Delta_{\vec{\rho}_k}\,F\,\phi = \phi F[\phi(\Delta_{\vec{\rho}_k}F) + 2(\nabla_{\vec{\rho}_k}\phi)(\nabla_{\vec{\rho}_k}F) + F(\Delta_{\vec{\rho}_k}\phi)] =$$
$$= \frac{1}{2}(\Delta_{\vec{\rho}_k}F^2)\phi^2 - (\nabla_{\vec{\rho}_k}F)^2\phi^2 + \qquad \text{(II-19)}$$
$$+ \frac{1}{2}(\nabla_{\vec{\rho}_k}F^2)(\nabla_{\vec{\rho}_k}\phi^2) + F^2\phi(\Delta_{\vec{\rho}_k}\phi) \quad .$$

Bei der Faltung mit den Grundzuständen heben sich der erste und der dritte Term über eine partielle Integration gegenseitig weg. Da F nicht vom Gesamtschwerpunkt abhängt, können wir außerdem zusammenfassen:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla_{\vec{R}}F)^2 + \sum_k \frac{\hbar^2}{2\mu_k}(\nabla_{\vec{\rho}_k}F)^2 = \frac{\hbar^2}{2M}\sum_i (\nabla_i F)^2 \quad , \qquad \text{(II-20)}$$

wobei M die Nukleonenmasse ist und i über alle Nukleonenkoordinaten läuft.

Insgesamt ergibt sich für die kinetische Energie

$$\langle \phi_1\phi_2\,\delta\chi \,|\, F\,T\,F \,|\, \phi_1\phi_2\,\chi\rangle = \frac{\hbar^2}{2M}\langle \phi_1\phi_2\,\delta\chi \,|\sum_i (\nabla_i F)^2 \,|\, \phi_1\phi_2\,\chi\rangle -$$
$$- \sum_k \frac{\hbar^2}{2\mu_k}\langle \phi_1\phi_2\,\delta\chi \,|\, F^2\,\Delta_{\vec{\rho}_k} \,|\, \phi_1\phi_2\,\chi\rangle - \qquad \text{(II-21)}$$
$$- \frac{\hbar^2}{2\mu}\langle \phi_1\phi_2\,\delta\chi \,|\, [(\frac{1}{2}\,\Delta_{\vec{R}}F^2) + (\nabla_{\vec{R}}F^2)\nabla_{\vec{R}} + F^2\,\Delta_{\vec{R}}] \,|\, \phi_1\phi_2\,\chi\rangle$$

Wir wollen nun annehmen, daß wir mit den exakten Grundzuständen für die beteiligten Atomkerne arbeiten. In diesem Fall gilt:

$$-\sum_k \frac{\hbar^2}{2\mu_k} \Delta_{\vec{\rho}_k} \Phi_1\Phi_2 + \sum_{i,j\epsilon\Phi_1} V_{ij}\,\Phi_1\Phi_2 + \sum_{i,j\epsilon\Phi_2} V_{ij}\,\Phi_1\Phi_2 = \tag{II-22}$$
$$= (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\,\Phi_1\Phi_2 \ .$$

Wir können daher den dritten Term in Gl. (II-21) zusammen mit einem Teil der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung zusammenfassen und als Grundzustandsenergie von der Gesamtenergie abziehen.

Der Fehler, den man dadurch macht, daß die angenommenen inneren Wellenfunktionen keine exakten Grundzustände sind, aber das Ritz'sche Variationsprinzip einigermaßen gut erfüllen, ist nach einer Untersuchung von S. Maeda /17/ klein.

Wir führen nun die Bezeichnungen

$$J(\vec{R}')\,\delta(\vec{R}' - \vec{R}'') = \langle \Phi_1\Phi_2\vec{R}' \mid F^2 \mid \Phi_1\Phi_2\vec{R}'' \rangle \ , \tag{II-23a}$$

$$W(\vec{R}')\,\delta(\vec{R}' - \vec{R}'') = \frac{\hbar^2}{2M} \langle \Phi_1\Phi_2\vec{R}' \mid \sum_i (\nabla_i F)^2 \mid \Phi_1\Phi_2\vec{R}'' \rangle \ , \tag{II-23b}$$

$$V_f(\vec{R}')\,\delta(\vec{R}' - \vec{R}'') = \langle \Phi_1\Phi_2\vec{R}' \mid \sum_{i\,\epsilon\Phi_1,\ j\epsilon\Phi_2} V_{ij} \mid \Phi_1\Phi_2\vec{R}'' \rangle \tag{II-23c}$$

ein und schreiben damit die linke Seite von (II-16a) um:

$$\langle \Phi_1\Phi_2\vec{R} \mid F\,(H - E)\,F \mid \Phi_1\Phi_2\chi \rangle =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(J(\vec{R})\,\Delta\chi(\vec{R}) + \nabla J(\vec{R})\,\nabla\chi(\vec{R}) + \frac{1}{2}\,\Delta J(\vec{R})\,\chi(\vec{R}) \right) + \tag{II-24}$$
$$+ \left(V_f(\vec{R}) + W(\vec{R}) \right) \chi(\vec{R}) - E_r\,J(\vec{R})\,\chi(\vec{R})$$

Wären die Nukleonen unterscheidbare Teilchen, so würde die gesamte rechte Seite von (II-16a) verschwinden und die effektive Wechselwirkung wäre allein durch (II-24) bestimmt. Aus Gl. (II-24) läßt sich jedoch wegen des energieabhängigen Terms und des

impulsabhängigen Anteils nicht ohne weiteres ein lokales Potential, wie es das einfache Faltungs-Modell liefert, herausziehen.

Deshalb transformieren wir die Relativwellenfunktion gemäß

$$\hat{\chi}(\vec{R}) = J^{1/2}(\vec{R})\,\chi(\vec{R}) \quad . \tag{II-25}$$

Es handelt sich dabei um eine sogenannte off shell-Transformation, die das asymptotische Verhalten von χ nicht ändert, denn J muß für große Radien gegen 1 gehen, da der im Mikroskopischen zugrundeliegende Operator F^2 ja nur kurzreichweitige Korrelationen beschreiben soll.

Außerdem multiplizieren wir die Bewegungsgleichung (II-16a) von links mit $J^{-1/2}$ durch und erhalten:

$$\begin{aligned}[T_r + \frac{V_f}{J} + \frac{W}{J} - \frac{1}{4}\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\nabla J}{J}\right)^2 - E_r\,]\,|\,\hat{\chi}> = \\ = \int d^3R'\,d^3R''\,J^{-1/2}(\vec{R}')\;<\phi_1\phi_2\vec{R}'\,|\,F\,\mathcal{A}'_{ext}\,(H-E)\,F\;|\,\phi_1\phi_2\vec{R}''> \times \\ \times\, J^{-1/2}(\vec{R}'')\;\hat{\chi}(\vec{R}'') \quad .\end{aligned} \tag{II-26}$$

Wir sehen, daß die linke Seite von (II-26) genau der gewöhnlichen Schrödingergleichung für Punktteilchen entspricht, mit der effektiven Wechselwirkung

$$\hat{V}_{eff} = \frac{V_f}{J} + \frac{W}{J} - \frac{1}{4}\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\nabla J}{J}\right)^2 \quad . \tag{II-27}$$

Der erste Term in $\hat{V}_{eff}$ ist der reine Faltungsanteil für die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung, der - solange das Nukleon-Nukleon-Potential in der Hauptsache attraktiv ist - anziehend wirkt, der zweite Term gibt die zusätzliche kinetische Energie wieder, die durch die Korrelationen verursacht wird. Er ist schon durch seine Definition stets repulsiv (vgl. (II-23b)). Der dritte Term wirkt dort, wo $\left(\frac{\nabla J}{J}\right)^2$ am größten ist, also vorzugsweise an der Kernoberfläche; er ist stets attraktiv.

Wenden wir uns nun der rechten Seite von (II-26) zu, so sehen wir, daß hier der Ausdruck

$$\hat{K}(\vec{R}', \vec{R}'') = J^{-1/2}(\vec{R}')\;<\phi_1\phi_2\vec{R}'\,|\,F\,\mathcal{A}'_{ext}\,F\,|\,\phi_1\phi_2\vec{R}''>\,J^{-1/2}(\vec{R}'') \tag{II-28}$$

dieselbe Rolle spielt wie der Normkern in der Bewegungsgleichung (II-5) des Resonating Group-Modells ohne Korrelationen. Wir bezeichnen deshalb $\hat{K}$ als korrelierten Normkern. Seine Eigenwerte und Eigenzustände wollen wir wieder mit n_i und u_i bezeichnen.

Das optische Fischgrätenmodell mit Korrelationen behandelt nun die rechte Seite von (II-24) in derselben Weise wie das ursprüngliche optische Fischgrätenmodell die rechte Seite der Resonating Group-Bewegungsgleichung (II-5), wobei jedesmal der korrelierte Normkern $\hat{K}$ an die Stelle des gewöhnlichen Normkerns tritt. Es wird also der nichtlokale Anteil der Wechselwirkung in einen Hauptteil und einen Restterm aufgespalten; anschließend wird der Restterm gegen eine Modifikation der effektiven Wechselwirkung $\hat{V}_{eff}$ "eingetauscht" und weggelassen. Inwieweit solche Manipulationen zulässig und sinnvoll sind und welche Probleme dabei auftreten, wird in den nächsten beiden Kapiteln diskutiert.

Zunächst soll der verwendete Formalismus aber noch näher erläutert und ausgeführt werden. In der Schreibweise mit der Fischgrätenmatrix lautet Gl. (II-24):

$$(T_r + \hat{V}_{eff} - E_r)\,|\hat{\chi}\rangle = \sum_{i,j} |u_i\rangle\, M_{ij}\, \langle u_i|\,(T_r + \hat{V}_{eff} - E_r)\,|u_j\rangle \times$$

$$\times\, \langle u_j|\hat{\chi}\rangle + V_{res}\,|\hat{\chi}\rangle \quad . \qquad \text{(II-29)}$$

Durch Vernachlässigen von V_{res} und Ersetzen des effektiven Resonating Group-Potentials $\hat{V}_{eff}$ durch ein optisches Direktpotential $\hat{V}_{opt}$ gelangen wir zu der Bewegungsgleichung des optischen Fischgrätenmodells mit Korrelationen:

$$(T_r + \hat{V}_{opt} - E_r)\,|\hat{\chi}\rangle = \sum_{i,j} |u_i\rangle\, M_{ij}\, \langle u_i|\,(T_r + \hat{V}_{opt} - E_r)\,|u_j\rangle \times$$

$$\times\, \langle u_j|\hat{\chi}\rangle \quad . \qquad \text{(II-30)}$$

Man könnte nun versuchen, $\hat{V}_{opt}$ zusammen mit den Termen auf der rechten Seite als effektive, nichtlokale Gesamtwechselwirkung des optischen Fischgrätenmodells mit Korrelationen zu interpretieren. Dies hätte jedoch den Nachteil, daß Eigenzustände zu unterschiedlichen Energien nicht zueinander orthogonal wären, da diese Wechselwirkung einen energieabhängigen Term enthält.

Diese Energieabhängigkeit läßt sich durch eine erneute off shell-Transformation beheben. Wir definieren

$$\hat{O} = 1 - \sum' |u_i> \eta_i <u_i|, \qquad |\hat{\chi}> = \hat{O}^{1/2} |\chi> \tag{II-31}$$

und multiplizieren die gesamte Gleichung von links mit $\hat{O}^{-1/2}$ /7/. Da der nichtlokale Anteil der Wechselwirkung auf einen Bereich in der Größenordnung der beiden vereinigten Kerndurchmesser begrenzt ist, kann auch (II-31) an der Asymptotik der Relativwellenfunktion nichts ändern.

Dieses Verfahren funktioniert nicht, wenn der korrelierte Normkern Eigenzustände mit dem Eigenwert 1 hat, da dann das Inverse von $\hat{O}$ nicht existiert. Für solch einen Eigenzustand gilt:

$$\int d^3R' d^3R'' J^{-1/2}(\vec{R}') u_i(\vec{R}') <\Phi_1\Phi_2\vec{R}'| F \not{A} F |\Phi_1\Phi_2\vec{R}''> \times$$
$$\times J^{-1/2}(\vec{R}'') u_i(\vec{R}'') = 1 - \eta_i = 0 \; . \tag{II-32}$$

Er entspricht also einem Zustand mit verschwindender mikroskopischer Norm. Zudem ist er für alle Energien eine Lösung von Gl. (II-30). Diese sogenannte redundante Lösung hat im Lösungsspektrum eigentlich nichts zu suchen, wenn unsere Bewegungsgleichung physikalisch interpretierbar sein soll. Wir sollten ihn also aus den Lösungen der Bewegungsgleichung herausprojizieren.

Wir lösen das Problem, indem wir bei der Definition von $\hat{O}$ alle redundanten Zustände aus der Spektraldarstellung des korrelierten Normkerns entfernen. Orthogonalität der Wellenfunktion zu den redundanten Zuständen erreichen wir, indem wir einen Energieverschiebungsterm ε einführen, der nur auf die redundanten Zustände wirkt und sie aus dem physikalisch interessanten Energiebereich hinaus zu sehr hohen positiven Energien verschiebt. Von

der Idee her ähnelt diese Methode dem Projektionsformalismus von Krasnopls'ky und Kukulin /24/ mit dem Unterschied, daß bei der hier angewendeten Methode die Lösung für alle Energien ungleich ε unverändert bleibt. Sie läßt sich, da die Projektionsenergie als hoch, aber endlich definiert wird, direkt numerisch anwenden.

Nach all diesen Umformungen lautet die Bewegungsgleichung für das optische Fischgrätenmodell mit Korrelationen schließlich:

$$(T_r + \hat{V}_{opt} - E_r)\,|\hat{\chi}\rangle = \sum_{i,j} |u_i\rangle\, \bar{M}_{ij}\, \langle u_i|\,(T_r + \hat{V}_{opt} - \varepsilon)\,|u_j\rangle \times \langle u_j|\hat{\chi}\rangle \quad ,$$

$$\bar{M}_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } u_i \text{ oder } u_j \text{ redundant,} \\ 1 - \sqrt{\dfrac{1-\eta_i}{1-\eta_j}} & \text{sonst, wenn } i<j\,, \\ 1 - \sqrt{\dfrac{1-\eta_j}{1-\eta_i}} & \text{sonst, wenn } i \geq j\,. \end{cases} \qquad \text{(II-33)}$$

Zum Verständnis von Gl. (II-33) beachte man, daß alle Diagonalelemente der $\bar{M}$-Matrix 0 sind, wenn ihr Index nicht einem der redundanten Zustände nach der Beziehung (II-32) entspricht.

4. Zusammenhang mit dem Saito-Modell

Im letzten Kapitel haben wir uns mit einer Sonderfallbehandlung für die redundanten Zustände der Relativbewegung auseinandergesetzt und gesehen, daß für diese Zustände die mikroskopische Norm verschwindet (vgl. Gl. (II-32)).

Physikalisch sinnvolle Lösungen sollten daher stets orthogonal zu den redundanten Zuständen sein. Redundante Zustände treten in beinahe allen Streusystemen auf, wenn für die Kern-Grundzustände der Oszillator-Grenzfall mit gleichem Weiteparameter angenommen wird (vgl. z.B. /19, 25/).

Saito erkannte, daß man bei leichten Systemen das Pauli-Prinzip schon allein dadurch zu einem großen Teil berücksichtigen kann, daß man ein effektives Potential vorgibt und die Zusatzforderung aufstellt, daß die Bewegungsgleichung in einem Raum gelöst wird, der orthogonal zu allen redundanten Zuständen ist /5/. Da die redundanten Zustände von der Wahl eines speziellen mikroskopischen Hamilton-Operators völlig unabhängig sind, ist dies eine einfache Möglichkeit, das Pauli-Prinzip genähert in ein optisches Potential einzubringen.

Die Bewegungsgleichung des Saito-Modells ist:

$$(T_r + V_{opt} - E_r)\,|\chi> = \sum_{red.} |u_i> <u_i|\,(T_r + V_{opt})\,|\chi> . \qquad \text{(II-34)}$$

Ein Vergleich mit dem optischen Fischgrätenmodell zeigt, daß im physikalisch relevanten Energiebereich beide Modelle auf dieselben Lösungen führen, wenn alle Normkerneigenwerte zu 0 oder 1 gesetzt werden. Das optische Fischgrätenmodell ist demnach eine Erweiterung des Saito-Modells, die auch Zustände mit Normkerneigenwerten zwischen 0 und 1 berücksichtigt. Diese werden oft als teilweise Pauli-verbotene Zustände der Relativbewegung bezeichnet, im Gegensatz zu den völlig verbotenen mit Eigenwert 1. In vielen Streusystemen treten außerdem Zustände mit Eigenwerten kleiner 0 auf.

Die Analogie zwischen Saito-Modell und optischem Fischgrätenmodell bleibt bestehen, wenn kurzreichweitige Nukleon-Nukleon-Korrelationen eingeführt werden. Das optische Fischgrätenmodell mit Korrelationen kann als Erweiterung eines Saito-Modells mit Korrelationen aufgefaßt werden.

Hier haben wir allerdings die Schwierigkeit, daß der Oszillator-Grenzfall für Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung mit stark repulsiven Komponenten, die zu Korrelationen führen, kein sinnvoller Ansatz für den Grundzustand mehr ist. In Untersuchungen von Horiuchi /19/ ebenso wie in den Berechnungen, die hier in Kapitel III.3 abgehandelt werden, zeigt es sich jedoch, daß ein Abgehen vom Oszillator-Grenzfall mit gleichem Weiteparameter zwar zum Verschwinden der völlig Pauli-verbotenen Zustände führt, daß die Normkerneigenwerte jedoch nicht weit von der 1 weg-

wandern. Die somit entstehenden nahezu Pauli-verbotenen Zustände können nach einem Vorschlag von Saito ebenso durch die Orthogonalitätsbedingung behandelt werden wie die völlig verbotenen Zustände /26/. Die physikalische Berechtigung für diese Möglichkeit besteht darin, daß nahezu verbotene Zustände zu sogenannten Pauli-Resonanzen führen /27/. Diese Eigenschaft des Resonating Group-Modells wird auch durch das optische Fischgrätenmodell reproduziert /7/. Außerhalb der Resonanzenergie ist der Resonanzzustand aber in der Relativwellenfunktion nur zu einem verschwindenden Teil enthalten, so daß hier die Orthogonalitätsbedingung angewendet werden kann.

Für den Bereich nahe der Resonanzenergie gibt es verschiedene Möglichkeiten. Bei den meisten leichten Systemen liegen die Resonanzenergien außerhalb des physikalisch interessanten Spektrums, so daß man die nahezu Pauli-verbotenen Zustände völlig als redundante Zustände ansehen kann; man setzt zu diesem Zweck die Normkerneigenwerte künstlich zu 1.

Bei schwereren Systemen sind die Niveauabstände geringer, weswegen Pauli-Resonanzen auch eine physikalische Bedeutung bekommen können. Resonanzbreiten und Resonanzenergien hängen in diesem Fall normalerweise empfindlich von der Restwechselwirkung ab. Das optische Fischgrätenmodell - dessen Direktpotential in solchen Systemen einen Imaginäranteil benötigt, um Absorption aus dem elastischen Kanal mitzubehandeln /6/ - kann aber durch leichte Modifikation der Normkerneigenwerte und einen zusätzlichen Energieverschiebungsterm für die nahezu verbotenen Zustände dennoch an die richtigen Resonanzenergien und -breiten angepaßt werden. Ohne den Energieverschiebungsterm liefert es für nahezu verbotene Zustände normalerweise unphysikalische Bindungszustände. Die Resonating Group-Methode ist hier zwar von der Theorie her überlegen, doch wird auch sie wegen der vereinfachenden Annahmen über die Kern-Grundzustände und die Nukleon-Nukleon-Potentiale nur in Ausnahmefällen die Resonanzenergien reproduzieren können. Das optische Fischgrätenmodell hat hier sogar den Vorteil, daß die Pauli-Resonanzen besonders leicht anpaßbar sind, da der nichtlokale Teil der Wechselwirkung schon in der Basis der Normkerneigenzustände vorliegt.

5. Schwierigkeiten bei der Definition des Direktpotentials

Wir wollen uns im folgenden mit dem Einfluß der Reichweite der Nukleon-Nukleon-Kraft auf die Stärke der durch Gl. (II-10) definierten Restwechselwirkung auseinandersetzen und daraus Schlußfolgerungen für das optische Fischgrätenmodell ableiten.

Als Extremfälle betrachten wir eine Nukleon-Nukleon-Kraft v_1, deren Reichweite groß gegen die Clusterabmessungen ist, und eine Kontaktkraft

$$v_c(r) = \delta(r) \tag{II-35}$$

mit der Reichweite 0. Kräfte sehr kurzer, aber endlicher Reichweite bezeichnen wir im folgenden mit v_s. Die realistischen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen setzen sich aus Beiträgen unterschiedlicher Reichweite zusammen, die zwischen beiden Extremen liegen.

Für sehr langreichweitige Kräfte ist die Restwechselwirkung nahezu 0, das Fischgrätenmodell ist ohne Fitting mit dem Resonating Group Modell identisch /6/. Geht man zu etwas kürzeren Reichweiten über, so bleibt die Restwechselwirkung bei einer Wigner-Kraft zunächst noch relativ klein, während bei Kräften mit Austauschmischung, z.B. einer Serber-Kraft, die Restwechselwirkung schneller anwächst. Solange die Reichweite groß gegen die Clusterdimensionen ist, ist die Restwechselwirkung jedoch für alle Austauschmischungen klein /28/.

Wir betrachten nun als Extrembeispiel einer kurzreichweitigen Kraft die Kontaktkraft v_c. Sie eignet sich natürlich nicht als Modell für die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung in der Resonating Group Theorie und kann nur zur Veranschaulichung mathematischer Strukturen in der Gesamtwechselwirkung dienen. Das zu ihr gehörige Faltungspotential bezeichnen wir mit $V_{f,c}$.

Eine Kontaktkraft wirkt nur in der s-Welle, d.h. die Gesamtwechselwirkung sollte sich nicht ändern, wenn man sie durch einen Projektor auf gerade Partialwellen

$$P_{even} = \frac{1}{2}(1 + P_r) \tag{II-36}$$

ergänzt.

In einem völlig antisymmetrischen Nukleonensystem kann man P_r ersetzen gemäß

$$P_r \rightarrow -P_\sigma P_\tau \tag{II-37}$$

und kommt auf dieselbe Gesamtwechselwirkung; da die Resonating Group-Theorie die Antisymmetrisierung vollständig berücksichtigt, gilt dies auch für die effektive Wechselwirkung im Resonating Group-Modell.

Wir führen die Bezeichnung

$$v'_c(r) = \delta(r)\,\frac{1}{2}\,(1 - P_\sigma P_\tau) \tag{II-38}$$

ein; ganz allgemein wollen wir in diesem Kapitel Nukleon-Nukleon-Potentiale, die den in (II-38) vorkommenden Projektor auf antisymmetrische Spin-Isospin-Zustände enthalten, mit einem Strich bezeichnen, ebenso alle von ihnen abgeleitete Größen, z.B. Faltungspotentiale.

Wir können die Faltungspotentiale für v_c und v'_c leicht miteinander vergleichen, wenn wir den Erwartungswert $\langle \phi_1\phi_2 | P^\sigma_{ij} P^\tau_{ij} | \phi_1\phi_2 \rangle$ für das untersuchte Streusystem berechnen, wobei i und j für je ein Nukleon aus den beiden Clustern stehen.

Für die Systeme n-α und α-α ergibt sich, wenn wir von einem völlig raumsymmetrischen α-Teilchen ausgehen:

$$V'_{f,c} = \langle \phi_1\phi_2 \,|\, 1/2\,(1 - P^\sigma_{ij}P^\tau_{ij}) \,|\, \phi_1\phi_2 \rangle\, V_{f,c} = 6/16\; V_{f,c}\ . \tag{II-39}$$

Obwohl die Gesamtwechselwirkung im Resonating Group-Modell gleich ist, unterscheiden sich die Faltungspotentiale also um den Faktor 6/16. Der durch die Fischgrätenstruktur (II-11) gekennzeichnete Hauptterm der Wechselwirkung auf der rechten Seite von Gl. (II-10) kann diesen Unterschied nicht aufheben, da er sich aus $V_{f,c}$ und den Normkernzuständen allein bestimmt. Dementsprechend kann es auch dem optischen Fischgrätenmodell nicht ohne starke Änderung der Potentialstärke gelingen, die Gesamtwechselwirkung des Resonating Group-Modells für solch ein Potential zu reproduzieren.

In Anhang I wird gezeigt, daß in der Resonating Group-Theorie der Unterschied zwischen $V_{f,c}$ und $V'_{f,c}$ durch einen lokalen Anteil $V_{a,c}$ bzw. $V'_{a,c}$ in der Austauschwechselwirkung des Resonating Group-Modells kompensiert wird, für den gilt:

$$V_{a,c} = 1/4\, V_{f,c}\,, \quad V'_{a,c} = -\,V'_{f,c} = -\,6/16\, V_{f,c}\,,$$
$$V_{local} = V_{f,c} - V_{a,c} = 3/4\, V_{f,c}\,, \qquad \text{(II-40)}$$
$$V'_{local} = V'_{f,c} - V'_{a,c} = 2\, V'_{f,c} = 3/4\, V_{f,c} = V_{local}\,.$$

so daß der lokale Anteil der Wechselwirkung, wie zu erwarten, für v_c und v'_c gleich ist. Verwendet man statt v_c ein Nukleon-Nukleon-Potential v_s kurzer, aber endlicher Reichweite, so wird der $V_{a,c}$ entsprechende Term in der nichtlokalen Wechselwirkung zu einem Term $V_{a,s}$ mit sehr "enger" Nichtlokalität. Bei der Faltung mit einer Relativwellenfunktion zwischen den Clustern, die im physikalisch interessanten Energiebereich ja nicht sehr kurzwellig sein kann, verhält sich $V_{a,s}$ ähnlich einem lokalen Potential und kann durch ein solches approximiert werden.

Gl. (II-40) liefert uns ein Rezept, wie das Startpotential für die Fitting-Prozedur im optischen Fischgrätenmodell bei sehr kurzreichweitigen Kräften gewählt werden kann; wir erhalten

$$V_{start} = V'_{start} = 3/4\, V_{f,s} = 2\, V'_{f,s}\,, \qquad \text{(II-41)}$$

wobei der Strich wieder symbolisiert, daß eine Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung mit einer Austauschmischung nach (II-38) zugrundegelegt wird.

Für langreichweitige Nukleon-Nukleon-Potentiale v_l bzw. v'_l gilt dagegen je nach Art der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung

$$V_{start} = V_{f,l}\,, \quad V'_{start} = V'_{f,l} = 6/16\, V_{f,l}\,, \qquad \text{(II-42)}$$

da hier die Restwechselwirkung wirklich klein ist.

Für realistische Nukleon-Nukleon-Potentiale dürfte der Wert normalerweise zwischen beiden Extremen liegen. Setzt sich die Gesamtwechselwirkung aus Anteilen unterschiedlicher Reichweite zusammen, so kann man versuchen, für jeden einen eigenen Stärkeparameter in der Fitting-Prozedur zu definieren.

Man könnte einwenden, die starke Restwechselwirkung, die bei Nukleon-Nukleon-Potentialen mit kurzreichweitigen Anteilen auftritt, mache es unmöglich, mit dem optischen Fischgrätenmodell die Behandlung des Pauli-Prinzips durch die Resonating Group-Methode zu approximieren. Ein großer Teil der Restwechselwirkung wird aber gerade von V_a bzw. V'_a geliefert. Außerdem ist nach der Diskussion im vorigen Abschnitt ein wesentlicher Beitrag zur Pauli-korrekten Beschreibung leichter Systeme das Orthogonalitätsprinzip nach Saito, und dieses ist ja im optischen Fischgrätenmodell stets enthalten.

Zudem ist zu bedenken, daß ein Potential über die Wechselwirkung zwischen den beteiligten Körpern nicht mehr aussagt als alle Streuwellen, Bindungszustände und Bindungsenergien zusammen. Solange es möglich ist, durch Anpassung von Parametern die entsprechenden Größen aus einer Resonating Group-Rechnung zu reproduzieren, ist die Beschreibung der Wechselwirkung des Systems durch das optische Fischgrätenmodell mit der Beschreibung aus der Resonating Group-Rechnung äquivalent. Wegen des hohen numerischen Aufwands konnte für den Fall des optischen Fischgrätenmodells mit Korrelationen ein solcher Vergleich zwar noch nicht durchgeführt werden, doch weisen die Untersuchungen /20, 21/ darauf hin, daß diese Äquivalenz jedenfalls im ursprünglichen Fischgrätenmodell für eine große Klasse von Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen weitgehend erfüllt ist.

Es bleibt noch nachzutragen, daß wir unsere Überlegungen zu Stärke und Reichweite des optischen Direktpotentials auch für Anteile der effektiven Wechselwirkung durchführen können, die nicht vom Nukleon-Nukleon-Potential, sondern von Korrelationen herrühren.

Denn aufgrund der kurzen Reichweite der Korrelationen werden Situationen, wo nur ein Nukleonenpaar in einem Abstand ist, wo sich die Korrelationen auswirken, bei der Faltung den größten Anteil zur korrelationsbedingten Wechselwirkung erbringen. Gehen wir beispielsweise von einer Korrelationsfunktion vom Jastrow-Typ (II-15) aus,

$$F = \prod_{i\epsilon\Phi_1, j\epsilon\Phi_2} f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad ,$$

und setzen

$$g(r) = 1 - f(r) \quad , \tag{II-43}$$

so können wir nach der Anzahl der beteiligten Paare sortieren:

$$F = 1 - \sum_{i\epsilon\Phi_1,\, j\epsilon\Phi_2} g(r_{ij}) + \sum_{\substack{(i,j) \neq (k,l) \\ i,k \,\epsilon\, \Phi_1,\; j,l \,\epsilon\, \Phi_2}} g(r_{ij})\, g(r_{kl}) - \ldots \tag{II-44a}$$

und

$$F^2 = 1 - \sum_{i\epsilon\Phi_1,\, j\epsilon\Phi_2} \left(2g(r_{ij}) - g^2(r_{ij}) \right) + \ldots \quad . \tag{II-44b}$$

Die führenden Terme haben also stets die Gestalt eines Nukleon-Nukleon-Potentials. Eine ähnliche Überlegung läßt sich sogar durchführen, wenn in (II-44b) zwischen den beiden Jastrow-Faktoren Operatoren für externe Nukleon-Vertauschungen stehen.

Von diesen Überlegungen ausgehend, erwarten wir, daß unser Anteil W im effektiven Potential, der ja auf dem recht kurzreichweitigen mikroskopischen Operator $\sum_i (\nabla_i F)^2$ basiert, mit etwa 3/4 der Stärke, die sich aus einer naiven Faltung ergibt, in das optische Potential eingehen dürfte. Aufgrund der vielen Näherungsannahmen wären jedoch auch andere Stärken nicht verwunderlich, solange sie innerhalb der Grenzen von 6/16 und 1 bleiben.

6. Verallgemeinerung auf Drei-Körper-Rechnungen

In dieser Arbeit wird zwar auf eine Anwendung der Theorie in Problemen mit drei Clustern, z.B. dem α-α-Λ oder dem 3-α-System verzichtet, die hier abgeleiteten Potentiale sollen aber später als Input für solche Rechnungen verwendet werden. Deswegen wollen wir kurz die wichtigsten Probleme bei der Verallgemeinerung der Methode auf drei Kerne besprechen.

Man geht dazu von einer Resonating Group-Gleichung mit drei Clustern und mit Nukleon-Nukleon-Korrelationen aus:

$$\langle \Phi_1\Phi_2\Phi_3\,\delta\chi \,|\, F\,\mathcal{A}\,(H-E)\,\mathcal{A}\,F \,|\, \Phi_1\Phi_2\Phi_3\,\chi\rangle = 0 \,. \qquad \text{(II-45)}$$

Die Relativwellenfunktion χ hängt dann von zwei Relativkoordinaten ab.

Man kann nun dieselben Schritte wiederholen, die wir für zwei Kerne vorgeführt haben, und so wieder auf ein optisches Fischgrätenmodell kommen. Als neues Problem tritt dabei auf, daß die nichtlokalen Anteile der Wechselwirkung nicht mehr kompakt sind. Unser Numerierungsschema (II-9a) für die Normkerneigenwerte bricht deshalb zusammen. Man kann diese Schwierigkeit jedoch umgehen, indem man aus der nichtlokalen Wechselwirkung Anteile herauszieht, die nur ein Paar miteinander wechselwirkender Kerne enthalten und die in Bezug auf die Relativkoordinate zum dritten Kern gleich dem Einheitsoperator sind /29/.

Bei dieser Herleitung treten Drei-Körper-Kräfte zwischen den Clustern auf. Teilweise stammen sie von der Antisymmetrisierung. Es handelt sich dabei um nichtlokale Wechselwirkungsanteile, die deshalb besonders schwer zu veranschaulichen sind. Untersuchungen deuten jedoch darauf hin, daß sie durch die off-shell-Transformation (II-31) stark reduziert werden können /30/. Eine weitere Art von Drei-Körper-Kräften, diesmal lokaler Natur, kommt durch den Korrelationsfaktor F ins Spiel, der ja gleichzeitig auf alle Teilchen wirkt. Sie können durch das Studium von Systemen wie ${}^{\;\;6}_{\Lambda\Lambda}\mathrm{He}$, wo die Antisymmetrisierung keine Rolle spielt, gesondert untersucht werden /17/.

Die Näherung, auf Drei-Körper-Kräfte zu verzichten und einfach die durch Gleichung (II-33) definierte Wechselwirkung als Potential zwischen den beteiligten Kernen anzunehmen und in eine Drei-Körper-Rechnung einzusetzen, läßt sich dann rechtfertigen, wenn nachgewiesen werden kann, daß die Drei-Körper-Kräfte klein sind. In diesem Fall könnte man die Kerne quasi als "elementare" Teilchen ansehen /31/. Die Untersuchungen von Maeda /17/ deuten darauf hin, daß dies jedenfalls für die durch Korrelationen erzeugten Drei-Körper-Kräfte nicht in ausreichendem Maße der Fall ist: die Bindungsenergie von ${}^{6}_{\Lambda\Lambda}\mathrm{He}$ wird durch sie um 0.5 MeV reduziert.

III. Durchgeführte Untersuchungen und Ergebnisse

Betrachtet man die Bewegungsgleichung (II-33) des optischen Fischgrätenmodells mit Korrelationen,

$$(T_r + \hat{V}_{opt} - E_r)\,|\hat{\chi}> = \sum_{i,j} |u_i>\, \bar{M}_{ij} <u_i|\,(T_r + \hat{V}_{opt} - \varepsilon)\,|u_j> \times$$
$$\times\, <u_j|\hat{\chi}> \quad ,$$

so sieht man, daß die Auswertung der Gleichung drei Schritte erfordert:

1. Es müssen die Matrixelemente (II-23) bestimmt werden, um zu einem effektiven Direktpotential $\hat{V}_{eff}$ nach der Resonating Group-Methode zu kommen.
2. Eigenzustände und Eigenwerte des korrelierten Normkerns $\hat{K}$ müssen aufgefunden werden.
3. In das Direktpotential aus dem ersten Schritt müssen Fitting-Parameter eingesetzt werden, um die experimentellen Ergebnisse reproduzieren zu können.

Für die Schritte 1. und 2. müssen Integrationen über alle Cluster-internen Koordinaten ausgeführt werden, was zu hochdimensionalen Integralen führt. Diese Integrationen wurden in der hier vorliegenden Arbeit mit Hilfe einer sogenannten Quasi-Random-Number-Methode (QRN) durchgeführt. Die Methode ähnelt in der technischen Durchführung der bekannten Monte Carlo-Methode, geht aber von anderen theoretischen Voraussetzungen aus und führt bei einer großen Klasse von Funktionen zu einer wesentlich schnelleren Konvergenz /32/. Die hier verwendeten Integranden erfüllen nicht alle in /32/ angegebenen hinreichenden Voraussetzungen für die Konvergenz der Methode; deshalb wird die Anwendbarkeit der Methode in Anhang II diskutiert; dort wird auch eine Konvergenzabschätzung gegeben.

Der dritte Schritt erfordert vor allem die Lösung einer linearen Integrodifferentialgleichung, nämlich der Bewegungsgleichung

(II-33). Um die Gleichung zu lösen, wurde ein ursprünglich aus Japan stammendes Programm zur Berechnung der Streuphasen weiterentwickelt. Es wurde von S. Saito in Tübingen implementiert und basiert auf der Wigner-Eisenbud'schen R-Matrix-Theorie /33/. Da zur Lösung der Bewegungsgleichung (II-33) sehr viele gute und erprobte Algorithmen zur Verfügung stehen, wird auf die numerischen Einzelheiten des Programms hier nicht eingegangen. Es sei nur erwähnt, daß es sich bei numerischen Tests als etwa 10 Mal schneller erwies als ein stark auf optimale Rechenzeit ausgelegtes Streuphasenprogramm nach dem Robertson-Verfahren /34/. In der für die Arbeit verwendeten Form kann das Programm selbsttätig einen Fit der Potential-Parameter zur Reproduktion der experimentellen Streudaten durchführen; die Modifikation hierfür verwendeter Programmteile aus der NAG-Bibliothek und geht auf H. Klar zurück, der sie unter anderem für die Untersuchungen in /21/ eingesetzt hat.

Die Schritte 1. bis 3. wurden in der hier vorliegenden Arbeit an den Systemen n-α und α-α durchgeführt. Vor den eigentlichen Berechnungen müssen aber zunächst einmal die in den Ansatz eingehenden Größen, nämlich das $\hat{V}_{eff}$ zugrundeliegende Nukleon-Nukleon-Potential, die Korrelationsfunktion F und der Grundzustand des α-Teilchens, bestimmt werden.

1. Wahl der in den Ansatz eingehenden Größen

a) Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung

Allen Untersuchungen zugrundegelegt wurde in starkes Nukleon-Nukleon-Potential der Gestalt

$$V = \begin{cases} +\infty & r \leq r_c, \\ \frac{1}{2} V_{0t} (1 + P_\sigma) e^{-\lambda_t (r - r_c)} + & \\ + \frac{1}{2} V_{0s} (1 - P_\sigma) e^{-\lambda_s (r - r_c)} & r > r_c \ . \end{cases} \qquad \text{(III-1)}$$

Es ist zwar insofern wenig realistisch, als es weder Tensor- noch Spin-Bahn-Kräfte enthält, doch dadurch werden numerische Untersuchungen wesentlich vereinfacht. Da es hard core-Korrelationen verursacht, eignet es sich besonders für die in dieser Arbeit beabsichtigten Untersuchungen.

Durch geeignete Wahl der Parameter konnten Tang, Schmid und Herndon mit einem Potential vom Typ (III-1) die Nukleon-Nukleon-Streudaten bei niederer Energie reproduzieren und in Variationsrechnungen vernünftige Schätzwerte für die Bindungsenergien und Radien von Triton und α-Teilchen erhalten /35/. Für hard core-Radien von 0.2, 0.4 und 0.6 fm ergaben sich dabei die folgenden Parametersätze:

a) $r_c = 0.2$ fm, $V_{0t} = 286.246$ MeV, $V_{0s} = 155.046$ MeV,
$\lambda_t = 1.8946$ fm^{-1}, $\lambda_s = 1.6608$ fm^{-1},

b) $r_c = 0.4$ fm, $V_{0t} = 475.044$ MeV, $V_{0s} = 235.414$ MeV,
$\lambda_t = 2.5214$ fm^{-1}, $\lambda_s = 2.0344$ fm^{-1}, (III-2)

c) $r_c = 0.6$ fm, $V_{0t} = 947.023$ MeV, $V_{0s} = 397.307$ MeV,
$\lambda_t = 3.6765$ fm^{-1}, $\lambda_s = 2.6272$ fm^{-1} .

Abbildung III-1 veranschaulicht die zugehörigen Potentialformen.

Bei Nukleon-Nukleon-Potentialen mit hard core geht man heute meistens von einem hard core-Radius von ca. 0.4 fm aus, deswegen wurde für die meisten Untersuchungen der Parametersatz (III-2b) zugrundegelegt. Für Kontroll- und Vergleichsrechnungen wurden gelegentlich auch die beiden anderen Parametersätze verwendet.

Eine Schwierigkeit beim Arbeiten mit dem Potential (III-1) ist, daß es keine even-odd-Abhängigkeit aufweist. Dies liegt daran, daß es ursprünglich nur für Probleme eingesetzt wurde, wo in der Nukleon-Nukleon-Relativbewegung nur gerade Bahndrehimpulse auftreten. Es ist zwar einfach, mit Hilfe eines zusätzlichen Operators $\frac{1}{1+\lambda}(1 - \lambda P_\sigma P_\tau)$ der auf das gesamte Potential angewandt wird, jede beliebige even-odd-Aufspaltung zu produzieren. Dem steht aber entgegen, daß nach den Oberlegungen in Kapitel II.5 die bekannte Ersetzung (II-37)

$$P_r \rightarrow -P_\sigma P_\tau$$

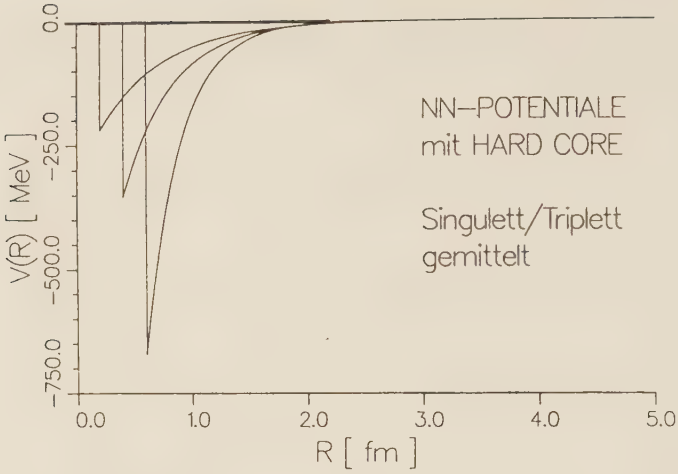


Abb. III-1

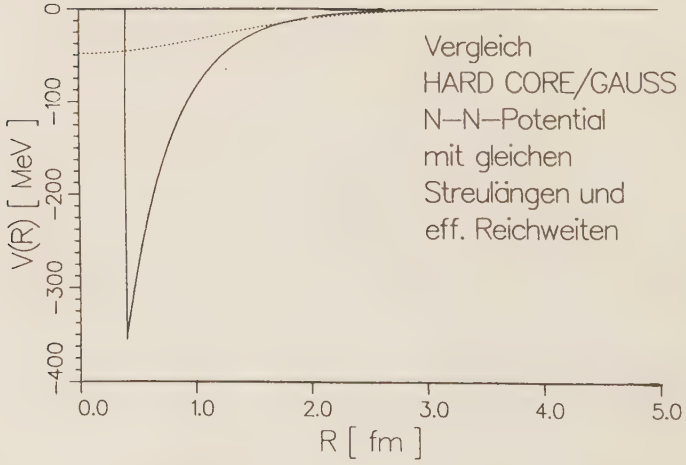


Abb. III-2

bei der Bestimmung des Faltungspotentials nicht angewendet werden sollte. Deshalb wird eine Partialwellenabhängigkeit in den Faltungsrechnungen zunächst unberücksichtigt gelassen; sie wird dann anhand der Ergebnisse der Faltungsrechnungen erneut diskutiert.

b) Wahl der Korrelationsfunktion

Auch wenn das Nukleon-Nukleon-Potential schon gegeben ist, bleibt noch Freiheit bei der Wahl der Korrelationsfunktion.

Wir nehmen für F die übliche Jastrow-Gestalt (II-15) an:

$$F = \prod_{i\in\Phi_1, j\in\Phi_2} f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad .$$

Für die Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion f kennen wir die Randbedingungen

$$f(r) = 0 \qquad r < r_c \qquad \text{(III-3a)}$$

und

$$f(r) \to 1 \qquad r \to \infty \quad . \qquad \text{(III-3b)}$$

Für das Verhalten dazwischen müssen wir zunächst einmal fordern, daß f glatt sein sollte; außerhalb der Reichweite des Nukleon-Nukleon-Potentials muß es recht rasch gegen 1 gehen.

Eine mathematisch präzisere Konstruktionsvorschrift läßt sich durch die Überlegung rechtfertigen, daß auch in einem Viel-Nukleonen-System die Relativwellenfunktion zweier Nukleonen auf kurze Abstände durch die Lösung der Zwei-Teilchen-Schrödinger-Gleichung gegeben ist, wenn die anderen Nukleonen so weit entfernt sind, daß sie die Relativbewegung des Paars nicht stören können (vgl. hierzu /36/ und die Diskussion in /17/). Wir definieren zunächst ein gemitteltes Nukleon-Nukleon-Potential

$$V_e = -\frac{1}{2}\left(V_{\text{singulett}} + V_{\text{triplett}}\right) \quad . \qquad \text{(III-4)}$$

In den Systemen n-α und α-α , wo in der Relativbewegung zwischen Nukleonen Singulett- und Triplett-Zustand gleich wahrscheinlich sind, ist die Mittelung aus Singulett- und Triplett-Potentialen

wie in (III-4) mit gleichen Anteilen angemessen, in manchen anderen Systemen, z.B. d-d, müßten gegebenenfalls geeignete Gewichtungsfaktoren eingeführt werden.

Wir lösen die radiale Schrödinger-Gleichung der Nukleon-Nukleon-Relativbewegung mit v_e für $l = 0$ bei einer zunächst frei wählbaren Energie ε:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{M}\frac{d^2}{dr^2} + v_e - \varepsilon \right) \varphi_e(r) = 0 \quad . \tag{III-5a}$$

Sodann definieren wir ein möglichst glattes Hilfspotential v_g, das aber dieselbe Streulänge und effektive Reichweite haben soll wie v_e.

Wir bestimmen auch für v_g die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung mit der Drehimpulsquantenzahl $l = 0$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{M}\frac{d^2}{dr^2} + v_g - \varepsilon \right) \varphi_e(r) = 0 \quad . \tag{III-5b}$$

Unsere Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion definieren wir als den Quotienten

$$f(r) = \frac{\varphi_e(r)}{\varphi_g(r)} \quad . \tag{III-6}$$

Wir adjustieren dazu die Tiefe von v_g leicht, so daß bei der Energie ε für v_e und v_g <u>exakt</u> dieselbe $l=0$ - Streuphase auftritt. Dadurch erfüllt (bei geeigneter asymptotischer Normierung) f automatisch die Bedingung (III-3b); ebenso wird trivialerweise (III-3a) erfüllt.

Da die drei Parametersätze (III-2) alle die Niederenergie-Streudaten reproduzieren, ist v_g für sie nahezu identisch.

Die Energie ε sollte in etwa der zu erwartenden Relativenergie zweier Nukleonen bei der Streuung der beiden Kerne entsprechen. Wählt man ε zu groß, so wird f zu langreichweitig, wählt man es zu klein, so überschießt f die 1 um ein beträchtliches Ausmaß und sinkt dann wieder ab.

Die Rechtfertigung dafür, daß wir f allein aus der s-Welle bestimmen, obwohl es in allen Partialwellen wirkt, liegt darin, daß die Zentrifugalbarriere die anderen Partialwellen im Bereich der Korrelationen schon ziemlich stark abschirmt, so daß der Beitrag der s-Welle am wichtigsten ist.

In den hier vorliegenden Rechnungen wurde das glatte Hilfspotential als vom Gauß-Typ gewählt

$$v_g = - V_0 e^{-\gamma r^2} \quad . \tag{III-7}$$

Abb. III-2 zeigt v_e und v_g für das Nukleon-Nukleon-Potential nach (III-2b) mit einem hard core-Radius von 0.4 fm.

v_g hat die Parameter

$$V_0 = 48.39 \text{ MeV} \quad , \quad \gamma = 0.37965 \text{ fm}^{-2} \quad . \tag{III-8}$$

Abb. III-3 zeigt Lösungen für Gl. (III-5) bei $\varepsilon = 10$ MeV und Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktionen für $\varepsilon = 0$, 10, 25 MeV.

Außer in einigen speziellen Untersuchungen wurde stets die Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion für $\varepsilon = 10$ MeV verwendet.

Zum Schluß sei vermerkt, daß wir durch das Ritz'sche Variationsprinzip eine gewisse Kontrolle über die Qualität der Korrelationsfunktion haben. Vernachlässigen wir zunächst einmal das Pauli-Prinzip, so müssen wir als Bestwahl für f diejenige ansehen, die das tiefste Direktpotential $\hat{V}_{eff}$ liefert, da dann Bindungszustände zwischen den Clustern energetisch am tiefsten liegen. In der Umgebung dieser Wahl für f wird sich $\hat{V}_{eff}$ bei leichten Variationen von f nur wenig ändern. Dies läßt sich auch anschaulich verstehen: ein etwas steileres f, das schneller gegen 1 geht, erhöht die kinetische Energie des Nukleonensystems, läßt aber auch zu, daß die Nukleonen von ihrer gegenseitigen Attraktion mehr "sehen". In der Umgebung der besten Wahl für f heben sich die beiden Effekte näherungsweise auf.

Da die Wahl von f aber nicht nur das Direktpotential, sondern über $\hat{K}$ auch die Gestalt der nichtlokalen Wechselwirkung beeinflußt, kann dieses Argument nur einen groben Anhaltspunkt geben.

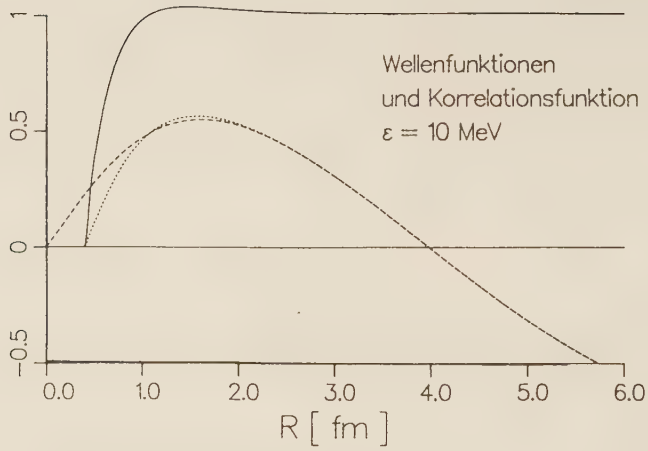


Abb. III-3a

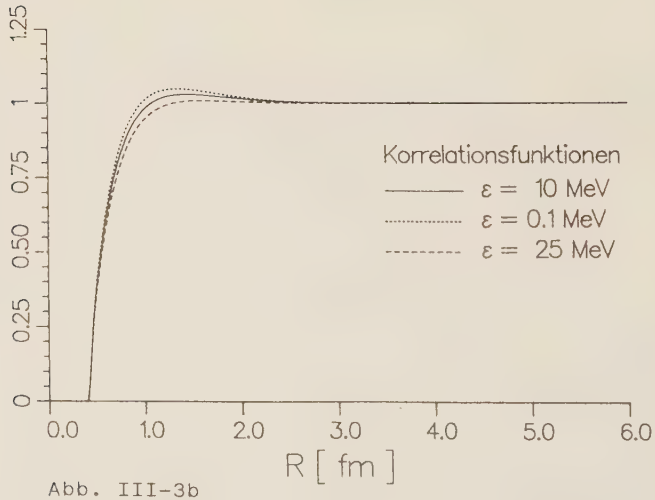


Abb. III-3b

c) Wahl des α-Grundzustands

Um die Faltung durchführen zu können, benötigen wir nun noch einen Ansatz für die Grundzustands-Wellenfunktion des α-Teilchens.

Die Wahl der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung legt es nahe, die von Tang, Herndon und Schmid in der Variationsrechnung /35/ ermittelte Bestform anzunehmen. Sie gehen von einer im Ortsraum vollständig symmetrischen Wellenfunktion

$$\Phi_\alpha = N \prod_{i<j} \varphi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \,. \tag{III-9}$$

aus. Für φ wurde der Ansatz

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_{\varepsilon'} \,, & r \leq b \\ r^{-1/3}\,(c_1 e^{-\lambda_1 r} + c_2 e^{-\lambda_2 r}) & \lambda_1 > \lambda_2 \,,\ r > b \end{cases} \tag{III-10}$$

gemacht. Dabei ist $\varphi_{\varepsilon'}$ eine Lösung von (III-5a) zur Energie ε'. Der langreichweitige Teil mit $e^{-\lambda_2 r}$ erzeugt im Außenbereich den exponentiellen Abfall bei der Separation eines Nukleons; er hängt mit der Nukleon-Separationsenergie zusammen über die Beziehung

$$\lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{12}} \sqrt{\frac{2ME_s}{\hbar^2}} \,. \tag{III-11}$$

Die Bez. (III-11) wurde in /35/ zum Test der Selbstkonsistenz der Variationsrechnung eingesetzt. Von den übrigen Parametern, nämlich b, c_1, c_2, λ_1, ε' aus Gl. (III-5a) sind nur drei unabhängig, da φ am Radius b glatt bleiben muß.

Für das durch den Parametersatz (III-2b) beschriebene Potential fanden Tang, Schmid und Herndon den Bestwert für die Bindungsenergie bei:

$$\lambda_1 = 3.4\ \text{fm}^{-1},\quad \lambda_2 = 0.315\ \text{fm}^{-1},$$
$$\varepsilon' = -20\ \text{MeV},\quad b = 1.20\ \text{fm} \quad . \tag{III-12}$$

Um die Stabilität des Verfahrens gegen leichte Variationen der α-Bindungswellenfunktion zu testen, wurden auch Rechnungen mit einem von der mathematischen Beschreibung her einfacheren α-Teilchen durchgeführt.

Für die Grundzustands-Wellenfunktion wurde wieder der vollständig raumsymmetrische Ansatz (III-9) gemacht, jedoch mit

$$\varphi(r) = f(r)\, e^{-\beta r^2/8} \quad . \tag{III-13}$$

Dabei steht f wieder für die Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion (III-6).

Ohne den Faktor f würde der Ansatz (III-13) für φ zum Oszillator-Grundzustand für das α-Teilchen führen. Wir können also schreiben

$$\Phi_\alpha = \prod_{i<j} f(r_{ij})\ \Phi_\alpha^{\text{h.o.}} = F^{\text{int}}\ \Phi_\alpha^{\text{h.o.}} \quad . \tag{III-14}$$

Durch diese Wahl des Grundzustands ist es möglich, die externe Korrelationsfunktion F mit den internen Korrelationsfunktionen F_{int} zu einer Gesamtkorrelationsfunktion F_{tot} zusammenzufassen, die in allen Teilchenkoordinaten symmetrisch ist:

$$F\ |\Phi_1 \Phi_2 \chi> = F\, F_1^{\text{int}} F_2^{\text{int}}\ |\Phi_1^{\text{h.o.}}\ \Phi_2^{\text{h.o.}}\ \chi> = F_{\text{tot}}\ |\Phi_1^{\text{h.o.}}\ \Phi_2^{\text{h.o.}}\ \chi> =$$
$$\prod_{i<j} f(r_{ij})\ |\Phi_1^{\text{h.o.}}\ \Phi_2^{\text{h.o.}}\ \chi> \quad . \tag{III-15}$$

Gl. (III-15) gilt für das α-α-Problem, im n-α-Problem verschwindet eine der beiden internen Korrelationsfunktionen.

Da F_{tot} in allen Teilchenkoordinaten symmetrisch ist, vertauscht es mit dem Antisymmetrisator. Dies hat eine bedeutsame Konsequenz: Wenn wir Zustände der Relativbewegung zwischen den Clustern betrachten, die durch das Pauli-Prinzip im Oszillatorschalenmodell völlig verboten sind, so folgt:

$$\mathcal{A} F |\Phi_1\Phi_2 u\rangle = \mathcal{A} F_{tot} |\Phi_1^{h.o.} \Phi_2^{h.o.} u\rangle = \\ = F_{tot} \mathcal{A} |\Phi_1^{h.o.} \Phi_2^{h.o.} u\rangle = 0 \quad . \tag{III-16}$$

Zustände, die nach dem Oszillatorschalenmodell völlig Pauliverboten sind, bleiben also auch hier Pauli-verboten. Mit diesem Ansatz für den Grundzustand bleibt somit das Orthogonalitätsprinzip nach Saito (vgl. Kap. II.4) vollständig erhalten.

Die off-shell-Transformation (II-25) ändert die Gestalt des verbotenen Zustands ein wenig. Es gilt:

$$K|u\rangle = |u\rangle \Leftrightarrow \hat{K}|\hat{u}\rangle = |\hat{u}\rangle \quad , \quad |\hat{u}\rangle = J^{1/2}|u\rangle. \tag{III-17}$$

Durch Vergleich des Normkernspektrums mit den beiden α-Grundzustandswellenfunktionen, die durch Einsetzen von (III-10) bzw. (III-14) in (III-9 entstehen, kann man somit feststellen, inwieweit die vom Oszillator-Grenzfall abweichende Gestalt (III-10) das Orthogonalitätsprinzip zerstört. Gl. (III-16) gibt uns außerdem ein recht zuverlässiges Kriterium für die Qualität der numerischen Integration in die Hand. Es ist evident, daß dieselbe Überlegung auch in beliebigen anderen Systemen von Clustern gemacht werden kann, wenn man nur die Bedingung (III-14) erfüllt.

Der Weiteparameter β für die Oszillatorfunktion in Gl. (III-14) wurde so gewählt, daß sich für die Nukleonendichte des α-Teilchens der literaturübliche rms-Radius von 1.41 fm ergab, dies wird erreicht durch

$$\beta = 0.597 \text{ fm}^{-2} . \tag{III-18}$$

Dieser Wert ist etwas größer als der, den wir ohne Korrelation in der Grundzustandswellenfunktion verwenden müssen. Das ist anschaulich ohne weiteres verständlich, da die Korrelationen ja

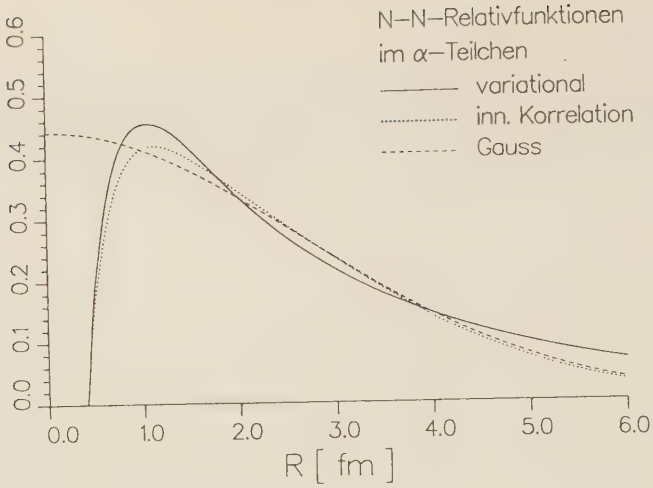


Abb. III-4

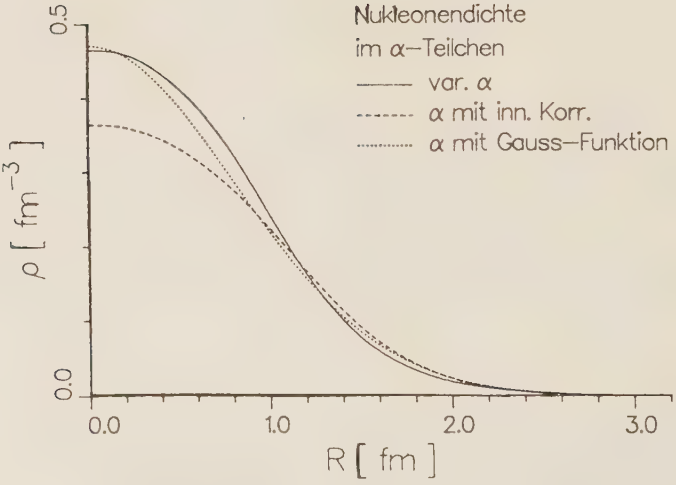


Abb. III-5a

dazu neigen, die Nukleonen auseinander zu drängen, so daß die Oszillatorfunktion enger zu wählen ist.

Der Variationsansatz von Tang, Schmid und Herndon /35/ liefert das Energieminimum bei einem vom literaturüblichen Wert nicht allzu stark abweichenden rms-Radius, so daß hier eine Anpassung nicht nötig ist.

Abb. III-4 vergleicht die Nukleon-Nukleon-Relativfunktionen φ untereinander und mit der für ein Oszillator-α-Teilchen mit einem Weiteparameter von 0.566 fm^{-2}. Abb. III-5 gibt denselben Vergleich für Nukleonendichte und radiale Nukleonenverteilung im α-Teilchen.

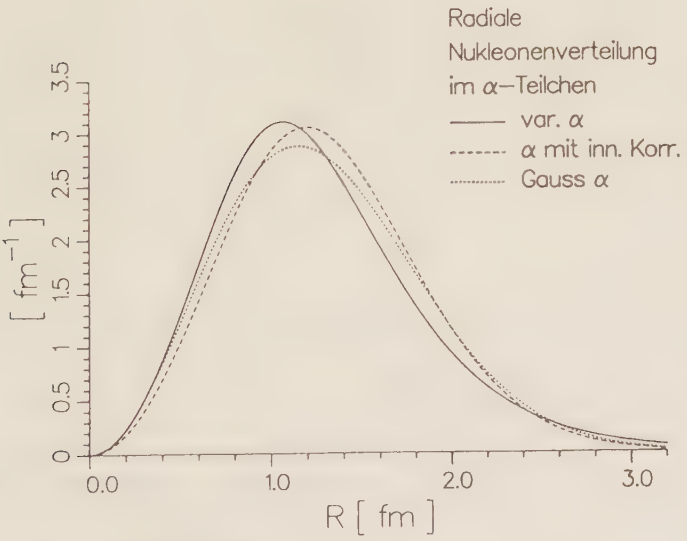


Abb III-5b

2. Direktpotential

a) Allgemeine Eigenschaften

Zur Bestimmung des Direktpotentials $\hat{V}_{eff}$ nach Gl. (II-27) müssen wir über alle inneren Teilchenkoordinaten der Cluster integrieren.

Hält man den Cluster-Abstand und die Koordinate des Gesamtschwerpunkts fest, so bleiben beim n-α-System 9, beim α-α-System 18 freie Jacobi-Koordinaten.

Um die statistische Genauigkeit für die Potentialtiefe in die Größenordnung von ca. einem Prozent zu bringen, war mit der QRN-Methode im n-α-Fall die Auswertung von ca. 400 000 Schätzwerten, im α-α-Fall sogar von ca. 1 Million Schätzwerten nötig (vgl. Anhang II).

Die Grundzüge der Potentialform konnten allerdings schon mit weniger Schätzwerten ermittelt werden, wobei statistische Ungenauigkeiten allerdings zu Beulen im Potentialverlauf führten (vgl. hierzu Abb. III-6).

Daß die statistische Ungenauigkeit bei diesem Verfahren so groß ist, liegt teilweise daran, daß nach Gl. (II-27) bei der Auswertung von

$$\hat{V}_{eff} = \frac{V_f}{J} + \frac{W}{J} - \frac{1}{4}\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\nabla J}{J}\right)^2$$

drei Terme auftreten, die nicht alle das gleiche Vorzeichen haben.

Nach der Definition (II-23b)

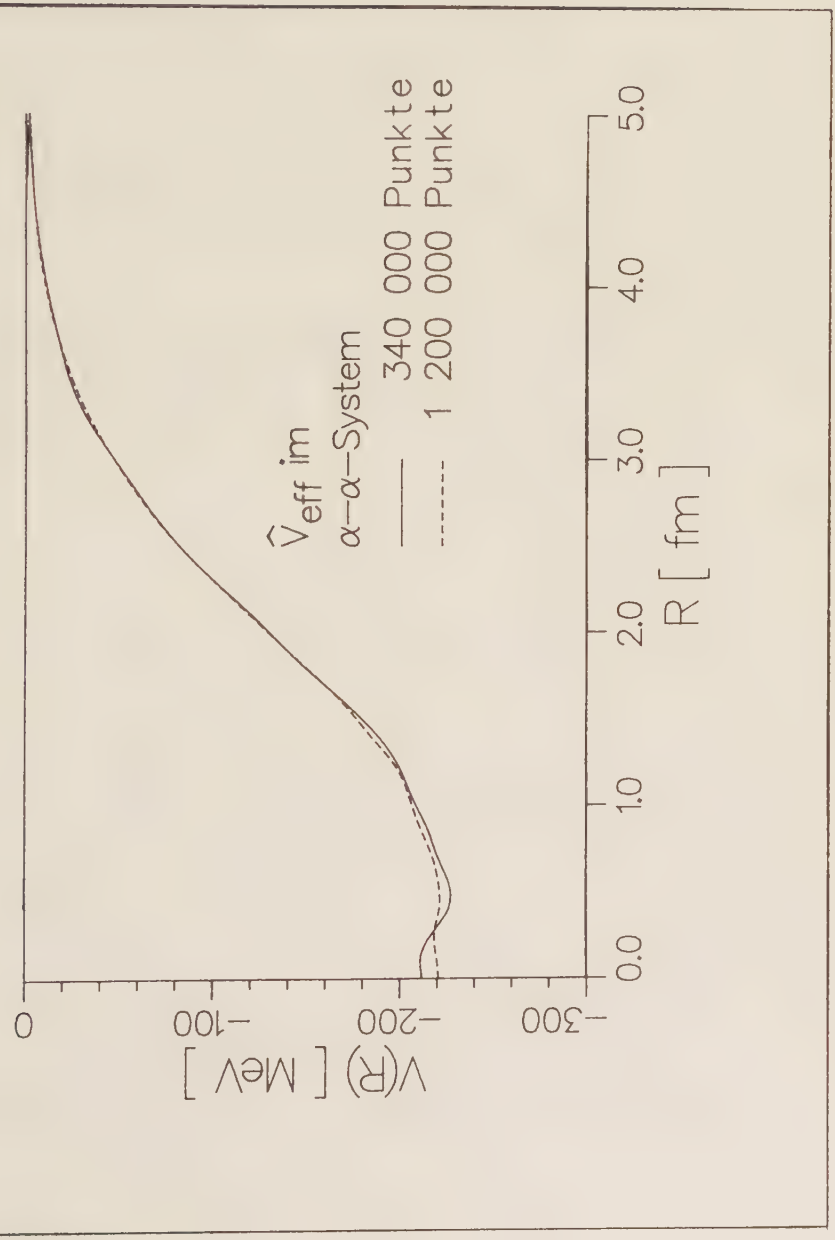
$$W(\vec{R}')\,\delta(\vec{R}' - \vec{R}'') = \frac{\hbar^2}{2M} < \Phi_1\Phi_2\vec{R}' \mid \sum_i (\nabla_i F)^2 \mid \Phi_1\Phi_2\vec{R}'' >$$

muß W/J für alle Abstände repulsiv sein. Nach Def. (II-23c)

$$V_f(\vec{R}')\,\delta(\vec{R}' - \vec{R}'') = < \Phi_1\Phi_2\vec{R}' \mid \sum_{i\,\epsilon\Phi_1,\ j\epsilon\Phi_2} v_{ij} \mid \Phi_1\Phi_2\vec{R}'' >$$

ist V_f/J dagegen stets attraktiv, wenn das zugrundegelegte Nukleon-Nukleon-Potential wie in unserem Fall außerhalb des hard core-Radius rein anziehend wirkt.

Abb. III-6


$\hat{V}_{eff}$ im
α–α–System
340 000 Punkte
1 200 000 Punkte
V(R) [MeV]
R [fm]
0
−100
−200
−300
0.0
1.0
2.0
3.0
4.0
5.0

Der dritte Term

$$U = -\frac{1}{4}\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\nabla J}{J}\right)^2 \qquad \text{(III-19)}$$

wirkt schon aufgrund seiner Definition immer anziehend.

Die Größe J, nach (II-23a) gegeben durch

$$J(\vec{R}')\,\delta(\vec{R}' - \vec{R}'') = \langle \Phi_1\Phi_2\vec{R}' \mid F^2 \mid \Phi_1\Phi_2\vec{R}'' \rangle$$

stellt den Zusammenhang zwischen der mikroskopischen Norm ohne Antisymmetrisierung und der Norm der Cluster-Relativwellenfunktion χ her, $J^{1/2}$ kann man somit als Cluster-Korrelationsfunktion interpretieren.

Abb. III-7a zeigt die relative Stärke der drei verschiedenen Beiträge zu $\hat{V}_{eff}$ im n-α-System, Abb. III-7b dasselbe im α-α-System. Wie im vorigen Kapitel besprochen, wurde dabei das Nukleon-Nukleon-Potential (III-2b) mit der Korrelationsfunktion nach (III-6) bei einer Anpaßenergie ε von 10 MeV verwendet; der α-Grundzustand stammt aus der Variationsrechnung /35/.

Ganz offensichtlich ist U vernachlässigbar klein, während die beiden anderen Terme von der gleichen Größenordnung sind. Statistische Ungenauigkeiten, die relativ zur Stärke von V_f/J oder W/J deutlich unter einem Prozent liegen, können somit relativ zur Stärke von $\hat{V}_{eff}$ mehrere Prozent ausmachen.

Die Auswertung von einer Million Schätzwerten im α-α-Fall erfordert eine Rechenzeit von rund 12 Stunden auf der zur Verfügung stehenden Rechenanlage vom Typ UNIVAC 1100/80. Für die in Kap. III.4 beschriebenen Anpassungsrechnungen zum Vergleich mit dem Experiment wurde tatsächlich von einem α-α-Direktpotential ausgegangen, das mit ca. 1.2 Millionen Schätzwerten ermittelt wurde. Dagegen wurden die in den jetzt folgenden Kapiteln besprochenen Vergleiche von Direktpotentialen mit verschiedenen Ausgangswerten für Grundzustand und Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion mit nur ca. 300 000 Schätzwerten durchgeführt, um Rechenzeit zu sparen. Statistische Ungenauigkeiten beim Vergleich wurden weitgehend dadurch ausgeschaltet, daß die Schätzwerte jeweils

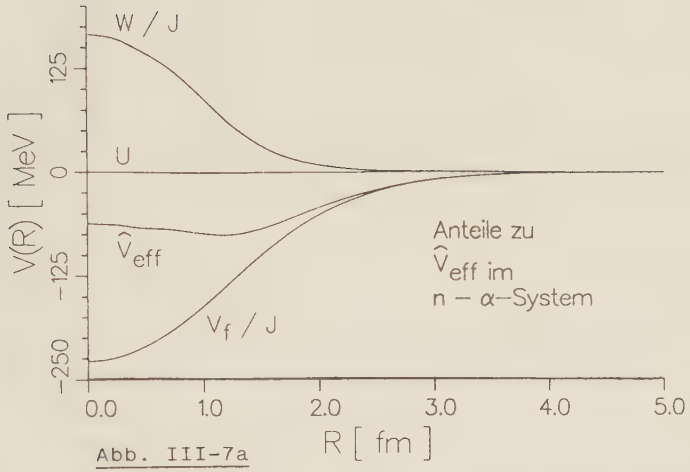


Abb. III-7a

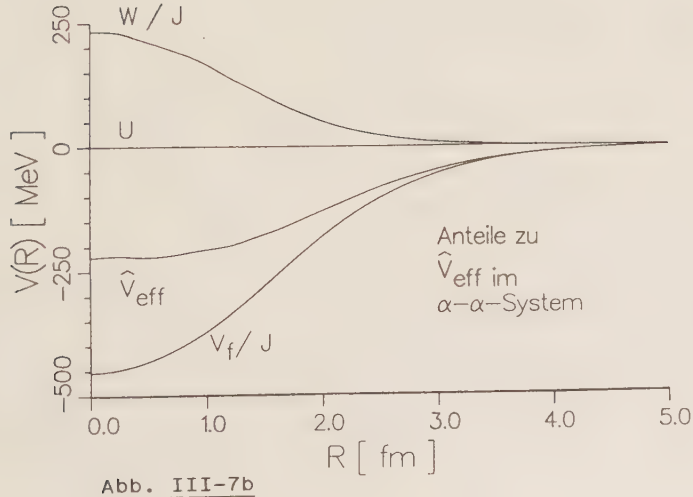


Abb. III-7b

an den gleichen Punkten im Konfigurationsraum ermittelt wurden. Dadurch gehen normalerweise die statistisch bedingten Abweichungen vom wahren Wert für alle miteinander verglichenen Potentiale in die gleiche Richtung. Dies sieht man recht gut daran, daß die Beulen im Potentialverlauf nahezu an denselben Stellen liegen. So ist ein Vergleich immer noch möglich, auch wenn die schließlich ermittelten Potentiale sich untereinander weniger unterscheiden als die statistischen Ungenauigkeiten ausmachen.

b) Abhängigkeit des Direktpotentials von Details der Korrelationsfunktion und vom Ansatz für den Cluster-Grundzustand

Wie bereits im vorigen Kapitel besprochen wurde, liegt in der Wahl der Korrelationsfunktion und der Cluster-Grundzustände eine gewisse Willkür. Wenn unsere Ergebnisse eine physikalische Bedeutung haben sollen, so dürfen leichte Änderungen an beidem auch nur geringe Auswirkungen auf das resultierende Direktpotential zwischen den Clustern haben.

Zum Test wurde das α-α-System mit dem bekannten Nukleon-Nukleon-Potential (III-2b), das einen hard core-Radius von 0.4 fm besitzt, verwendet.

Abb. III-8 zeigt einen Vergleich von Direktpotentialen $\hat{V}_{eff}$, die mit verschiedenen Grundzuständen für das α-Teilchen gerechnet wurden. Neben dem α-Teilchen aus der Variationsrechnung /35/ wurde auch die einfachere Grundzustandswellenfunktion (III-14) verwendet. Dabei wurde auch mit unterschiedlicher Anpaßenergie ε in Gl. (III-5) für die Korrelationsfunktion gerechnet. Die Stabilitätsforderung ist ganz offensichtlich recht gut erfüllt; der Unterschied tritt in $\hat{V}_{eff}$ kaum zu Tage.

Abb. III-9a zeigt Direktpotentiale $\hat{V}_{eff}$, bei denen stets der aus der Variationsrechnung /35/ folgende α-Grundzustand verwendet wurde, jedoch Korrelationsfunktionen, die mit verschiedenen Werten für ε in Gl. (III-5) berechnet wurden. Neben dem üblichen Wert von 10 MeV wurden auch Werte von 0.1 MeV und 25 MeV eingesetzt. Man findet auch hier eine gute Stabilität im Endergebnis.

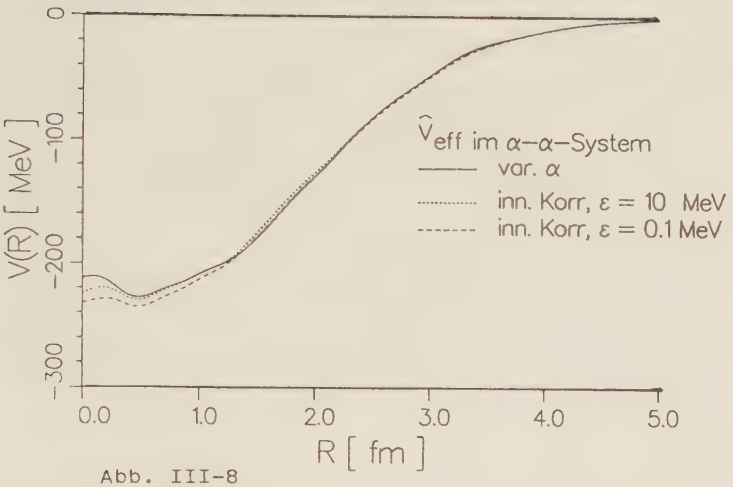


Abb. III-8

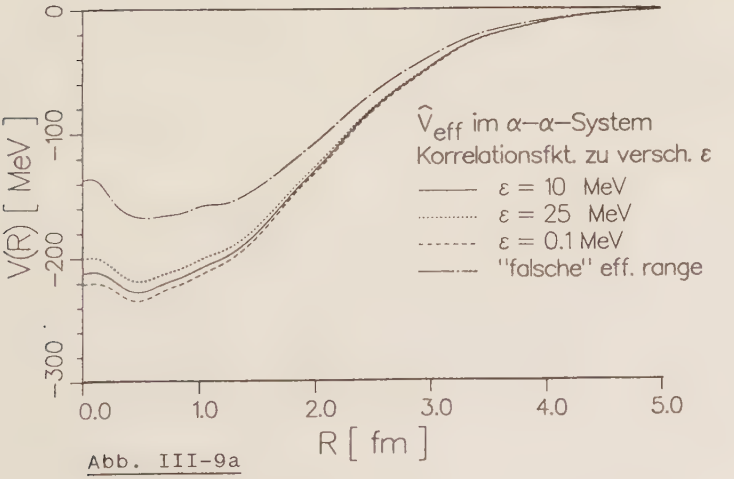


Abb. III-9a

Die am weitesten abweichende Kurve zeigt, daß dies nicht automatisch für jede willkürliche Wahl einer Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion f der Fall ist. Sie wurde gewonnen, indem bei der Bestimmung des glatten Vergleichspotentials V_g für Gl. (III-5b) die Forderung nach Übereinstimmung der effektiven Reichweite für V_e und V_g modifiziert wurde. Statt mit dem gesamten hard core-Potential V_e wurde die effektive Reichweite nur mit dem Teil außerhalb des hard core bestimmt. Es ist offensichtlich, daß dies zu einem wesentlich weniger attraktiven Direktpotential führt. Dies liegt daran, daß die Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion f bei dieser Wahl von V_g so langsam ansteigt, daß die Nukleonen von ihrer gegenseitigen Attraktion kaum noch etwas "sehen".

Abb. III-9b zeigt einen Vergleich von Direktpotentialen, die mit dem einfachen Ansatz

$$f(r) = \begin{cases} 0\,, & r \leq r_c \\ 1 - e^{-\lambda(r-r_c)}\,, & \lambda = 4\,,\ 5\,,\ 6.5\ \mathrm{fm}^{-1}\,,\ r > r_c \end{cases} \qquad \text{(III-20)}$$

für die Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion f berechnet wurden. Zum Vergleich ist auch $\hat{V}_{eff}$ mit unserer üblichen Korrelationsfunktion nach Gl. (III-6) bei einer Anpaßenergie ε von 10 MeV eingezeichnet. Man sieht, daß sich auch hier die Potentialform kaum ändert, während die Tiefe bei den einfachen Korrelationsfunktionen etwas kleiner ist.

Nach dem Ritz'schen Variationsprinzip sollte sich die beste Wahl der Korrelationsfunktion dadurch auszeichnen, daß man damit die tiefste Bindungsenergie zwischen den Clustern erhält, sofern überhaupt Bindungszustände vorliegen. In einer Erweiterung dieser Überlegung würde man somit als Bestwahl von f diejenige bezeichnen, die zum stärksten $\hat{V}_{eff}$ führt. Sieht man sich die Abbildungen III-9a und III-9b darauf hin an, so stellt man fest, daß die aus unseren mikroskopischen Überlegungen in Kapitel III. 1.b gewonnenen Korrelationsfunktionen denen mit der analytischen

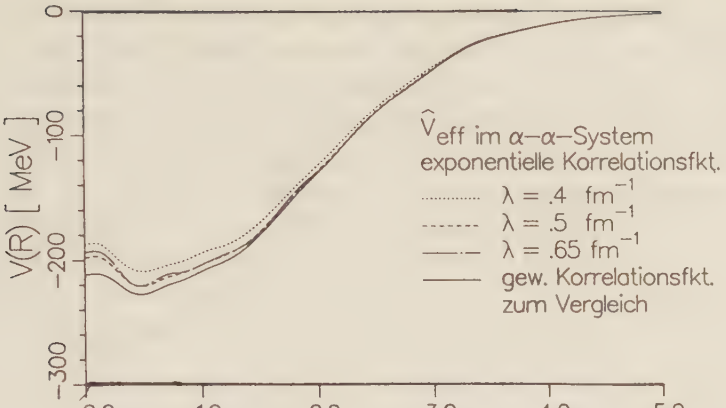


Abb. III-9b

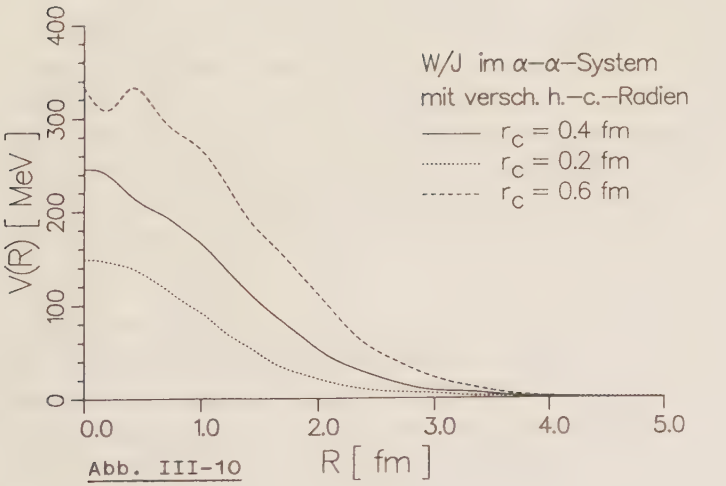


Abb. III-10

Form (III-20) tatsächlich etwas überlegen scheinen. Man darf das Kriterium aber auch nicht überinterpretieren, denn auch die nichtlokalen Anteile der Wechselwirkung hängen von f ab, und diese beeinflussen die Energie des tiefsten Bindungszustandes sehr drastisch, sofern Pauli-verbotene Zustände im System vorkommen. Deshalb wurde auch für die weiteren Rechnungen mit der Anpaßenergie von 10 MeV gerechnet, obwohl nach Abb. III-9a eine Anpaßenergie von 0.1 MeV zu einem etwas tieferen Direktpotential führen würde. Bei dieser Wahl hat f jedoch ein Maximum, das deutlich größer 1 ist und sich physikalisch schwer interpretieren läßt. Da sich zudem die Form des Direktpotentials kaum ändert und das hier errechnete Potential ja nur als Startwert für eine Fittung-Prozedur dienen soll, so ist die Wahl der nicht ganz "optimalen" Korrelationsfunktion vollends gerechtfertigt.

c) Abhängigkeit des Direktpotentials vom hard core-Radius

Von den drei Beiträgen zu $\hat{V}_{eff}$ nach Gl. (II-27) hängt nur V_f/J direkt vom Nukleon-Nukleon-Potential ab, W/J und U bestimmen sich alleine aus der Korrelationsfunktion.

Da U im Verhältnis zu den anderen Termen sehr klein ist, beschränken wir uns bei der Diskussion auf V_f/J und W/J.

Da W/J die durch die Korrelation erzeugte kinetische Energie wiedergibt, erwarten wir hier eine besonders deutliche Abhängigkeit vom hard core-Radius. Abb. III-10 zeigt W/J für das α-α-System mit den drei verschiedenen Parametersätzen (III-2a) bis (III-2c) mit hard core-Radien von 0.2, 0.4 und 0.6 fm. W/J gewinnt bei größeren hard core-Radien nicht nur an Höhe, sondern wegen der weiter hinausreichenden Korrelationsfunktion auch sehr deutlich an Weite.

Sieht man die Parametersätze (III-2) an, so würde man zunächst ein starkes Anwachsen der Tiefe von V_f/J für größere hard core-Radien erwarten, da bei $r_c = 0.6$ fm die Tiefe des Nukleon-Nukleon-Potentials nahezu dreimal so groß ist wie für $r_c = 0.2$ fm. Dem steht aber die viel geringere Reichweite des attraktiven Teils außerhalb des hard core entgegen. Sie bewirkt nicht nur, daß die Potentialstärke

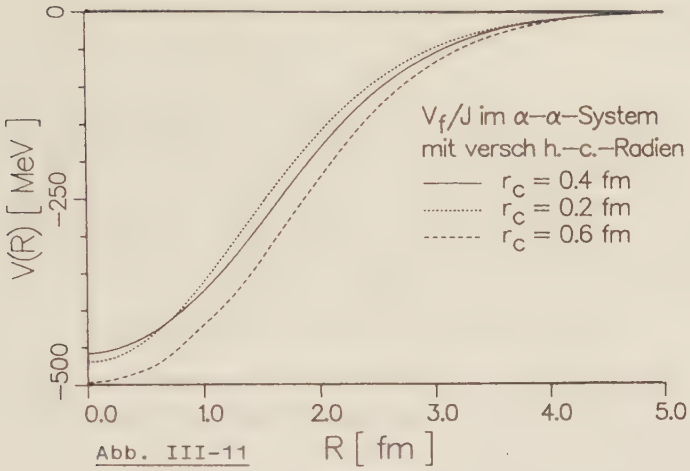


Abb. III-11

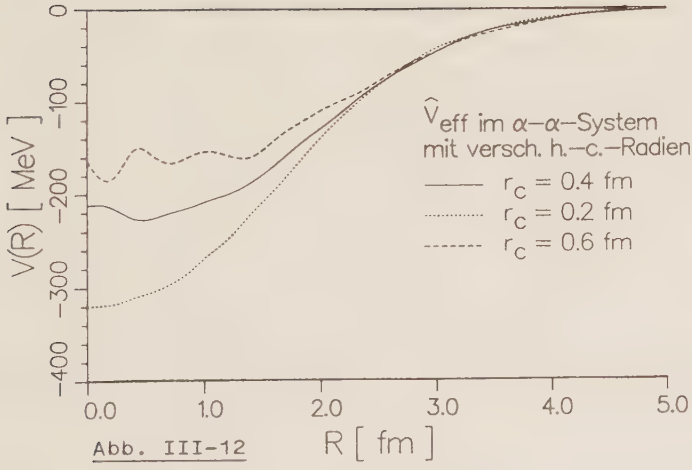


Abb. III-12

$$S = \int d^3r\, v(r) \qquad \text{(III-21)}$$

für den attraktiven Teil nicht so stark ansteigt wie die Tiefe, wichtiger ist noch der Effekt, daß sich für $r_c = 0.6$ fm der attraktive Teil des Potentials praktisch ausschließlich in dem Bereich befindet, wo die Korrelationsfunktion F noch sehr klein ist. Das Ergebnis sieht man in Abb. III-11: die Stärke von V_f/J wächst zwar mit dem hard core-Radius an, doch bei weitem nicht so stark, wie man beim Blick auf (III-2) zunächst vermuten würde.

Abb. III-12 zeigt schließlich einen Vergleich von $\hat{V}_{eff}$ für die unterschiedlichen Nukleon-Nukleon-Potentiale. Man sieht sofort, daß die Potentiale mit höheren hard core-Radien zu einem im Innenbereich deutlich weniger attraktiven $\hat{V}_{eff}$ führen. Die starke Welligkeit des Direktpotentials beim hard core-Radius von 0.6 fm kommt daher, daß sich hier V_f/J und W/J gegenseitig sehr weitgehend wegheben, so daß die in Teil a) dieses Kapitels besprochenen statistischen Effekte besonders stark sind.

Die deutlichen Unterschiede bei $\hat{V}_{eff}$ erscheinen insofern etwas überraschend, als die zugrundegelegten Nukleon-Nukleon-Potentiale ja dieselben Niederenergie-Streudaten liefern. Sie stehen jedoch völlig im Einklang mit den Ergebnissen der Variationsrechnung /35/ für das α-Teilchen: Auch hier ergab das Nukleon-Nukleon-Potential mit dem kleinsten hard core-Radius die größte Bindungsenergie. Wir haben es also mit einem echten Mehr-Teilchen-Effekt zu tun, der aus den Niederenergie-Streudaten allein nicht zu erschließen ist und hauptsächlich vom unterschiedlichen off shell-Verhalten der verschiedenen Potentiale herrührt.

Daß $\hat{V}_{eff}$ für größere hard core-Radien weniger attraktiv wird, steht im Einklang mit der Erwartung, daß durch die hard core-Korrelationen eine Sättigung für Viel-Nukleonen-Systeme zu erreichen ist.

d) Berücksichtigung der even-odd-Abhängigkeit des Nukleon-Nukleon-Potentials

Wir müssen nun noch berücksichtigen, daß ein sinnvoller Ansatz für die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung für ungerade Bahndrehimpulse eine nahezu verschwindende Kraft liefern sollte, was unser Ansatz (III-1) bisher nicht erfüllt.

Wir müssen unser Nukleon-Nukleon-Potential also noch durch einen Projektor auf gerade Bahndrehimpulse ergänzen:

$$v_{NN} = v\,\frac{1}{2}\,(1 + P_r) \approx v\,\frac{1}{2}\,(1 - P_\sigma P_r)\ . \qquad \text{(III-22)}$$

Nach den Oberlegungen in Kapitel II.5 sind die beiden Schreibweisen für den Projektor aber nur dann äquivalent, wenn sie auf ein bereits vollständig antisymmetrisches Nukleonensystem angewendet werden, was bei unserer Bestimmung des Direktpotentials aber nicht der Fall ist.

Eine direkte Auswertung des P_r-Terms würde zu einem nichtlokalen, schwer interpretierbaren und noch schwerer numerisch berechenbaren Direktpotential führen und erscheint deshalb wenig aussichtsreich.

Nach den Untersuchungen /28/ können wir jedoch die einfacher auswertbare Schreibweise mit Spin-Isospin-Austausch-Operatoren jedenfalls dann verwenden, wenn unser Nukleon-Nukleon-Potential langreichweitig ist; in diesem Fall liefern Fischgrätenmodell und Resonating Group-Modell nahezu dieselbe Wechselwirkung, auch wenn sie Spin-Isospin-Austauschterme enthalten.

Definieren wir eine mittlere Reichweite unseres Potentials über

$$\bar{r}^2 = \frac{\int d^3r\, v(r)\, r^2}{\int d^3r\, v(r)} \qquad \text{(III-23)}$$

und betrachten nur den attraktiven Potentialanteil, so finden wir für den Parametersatz (III-2b) eine Reichweite von nahezu 2 fm. Damit ist die Reichweite zwar nicht groß gegen den Kernradius, was für eine volle Äquivalenz des Fischgrätenmodells mit dem (völlig antisymmetrischen) Resonating Group-Modell notwendig wäre, doch ist sie immerhin vergleichbar mit dem Kernradius.

Nach den Überlegungen in Kapitel II.5 können wir als Ausgangspunkt für die Fitting-Prozedur des optischen Fischgrätenmodells somit eine Potentialstärke verwenden, die nach Gl. (II-38) etwa 6/16 der durch unsere Faltungsrechnungen ermittelten entspricht. Da die Fitting-Prozedur maßgeblich zum optischen Fischgrätenmodell gehört, brauchen wir uns in der Potentialstärke zunächst nicht genauer festlegen; der endgültige Wert wird erst durch Anpassung an die experimentellen Streuphasen bestimmt.

Schwieriger ist die Behandlung des durch die Korrelationen entstehenden kinetischen Energie-Terms W/J. In unserem Ansatz für den Korrelationsoperator F haben wir zwar eine nur vom gegenseitigen Abstand abhängige Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion f, nach Gl. (II-15) ist

$$F = \prod_{i\in\Phi_1, j\in\Phi_2} \prod f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad .$$

Es bleibt jedoch die Frage, ob dies angesichts unseres partialwellenabhängigen Nukleon-Nukleon-Potentials physikalisch sinnvoll ist. Zudem ist nach neueren Untersuchungen der sogenannte hard core zwischen den Nukleonen aus der Quark-Struktur der Nukleonen begründet /37/. In neueren Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen wird er daher durch eine erzwungene Nullstelle in der radialen Wellenfunktion für die s- und d-Welle zwischen den Nukleonen ersetzt und ist somit selbst nicht partialwellenunabhängig /38/.

Eine teilweise Lösung unserer Schwierigkeiten mit dem Anteil der kinetischen Energie erhalten wir, wenn wir bedenken, daß am hard core-Radius von 0.4 fm für $l = 1$ die Drehimpulsbarriere zwischen zwei Nukleonen bereits ca. 250 MeV hoch ist. Eine Drehimpulsabhängigkeit der Nukleon-Nukleon-Korrelationsfunktion f sollte deshalb ohnehin nur einen geringen Einfluß auf die Gesamtwechselwirkung zwischen den Clustern haben.

Nach den Überlegungen in Kapitel II.5 können wir den dem kinetischen Energie-Term W/J zugrundeliegenden Operator $(\nabla_i F)^2$ über eine Entwicklung (II-44a)

$$F = 1 - \sum_{i\epsilon\Phi_1,\ j\epsilon\Phi_2} g(r_{ij}) + \sum_{\substack{(i,j) \neq (k,l) \\ i,k \in \Phi_1,\ j,l \in \Phi_2}} g(r_{ij})\, g(r_{kl}) -$$

genähert als kurzreichweitiges Potential behandeln. Da die Reichweite von f so kurz ist, daß in einer vollständig antisymmetrischen Theorie eine Partialwellenabhängigkeit von f nur noch eine geringe Rolle spielt, können wir nach den Überlegungen aus Kapitel II.5 erwarten, daß die Stärke des W/J-Terms bei ca. 3/4 der Stärke, die aus unseren Faltungsrechnungen folgt, liegen dürfte. Aufgrund der vielen Unsicherheiten muß die Stärke von W/J jedoch in erster Linie als Parameter für die Fitting-Prozedur angesehen werden.

Dagegen ist die Weite von W/J recht gut definiert: Aufgrund der kurzen Reichweite der Korrelation wird sie durch das Überlappungsgebiet der beiden Cluster bestimmt. Besonders deutlich sieht man dies durch Vergleich von Abb. III-5 und III-7a: Form und Reichweite von W/J im n-α-System sind der radialen Nukleonendichte des α-Teilchens sehr ähnlich.

3. Der korrelierte Normkern

a) Allgemeine Bemerkungen

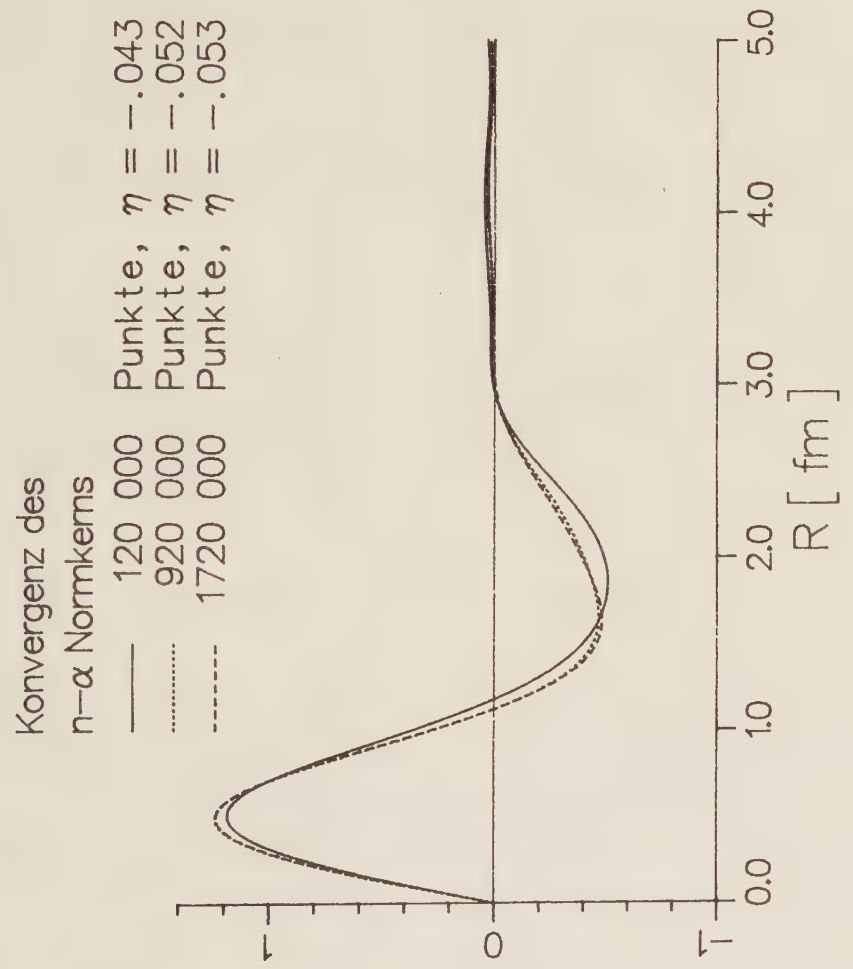
Normkerne mit Korrelationen wurden für die s-, d- und g-Wellen des α-α-Systems sowie für die s- und die p-Wellen des n-α-Systems berechnet.

Anstelle einer direkten Berechnung von $\hat{K}(\vec{R}',\vec{R}'')$ im Ortsraum wurde die Berechnung in einer Oszillatorbasis vorgenommen, d.h. es wurden Matrixelemente $\langle u_i^{h.o.}|\hat{K}|u_j^{h.o.}\rangle$ bestimmt. Die Dimension der Basis wurde für das α-α-System zu 16, für das n-α-System zu 20, in einigen Testrechnungen für beide Systeme zu 10 gewählt. Diese Methode hat den Vorteil, daß die ermittelten Eigenfunktionen im Ortsraum von selbst glatt sind, während eine Berechnung in einem Ortsgitter eine Interpolation erfordert, um die Matrixelemente der kinetischen Energie $\langle u_i|T|u_j\rangle$ zu berechnen. Bei Testrechnungen auf einem Ortsgitter, das wegen des hohen numerischen Aufwands zur Berechnung eines einzelnen Punktes nur recht weitmaschig gewählt werden kann, ergaben sich stets ziemliche Abhängigkeiten der Matrixelemente vom Interpolationsverfahren. Bei der Berechnung in einer Oszillatorbasis steigt der Rechenaufwand dagegen nicht so stark mit der Dimension der Basis an, da alle räumlichen Koordinaten in $\langle\phi_1\phi_2 u_i^{h.o.}|F\,\delta'_{ext}F|\phi_1\phi_2 u_j^{h.o.}\rangle$ für alle Matrixelemente gleich gewählt werden können, so daß der größte Teil des Aufwands bei der Berechnung des Integranden pro Schätzwert nur einmal für alle Matrixelemente gemeinsam anfällt.

Bei der Berechnung in der Oszillatorbasis ist nur die Koordinate des Gesamtschwerpunkts vorgegeben; alle anderen Teilchenkoordinaten sind frei, so daß sich für das n-α-System eine 12-dimensionale, für das α-α-System gar eine 21-dimensionale Integration ergibt. Für den n-α-Fall waren mit dem QRN-Verfahren ca. 1 Million Schätzwerte zu berücksichtigen, für den α-α-Fall ca. 4 Millionen, um Konvergenz zu erzielen. Gute Kriterien für die Konvergenz des Integrals sind die in Kapitel III.1.c besprochene Erhaltung der redundanten Zustände, ein recht glatter Verlauf der ermittelten Eigenzustände und natürlich die Forderung, daß

Konvergenzverhalten des
bedeutendsten Zustands mit
negativem Eigenwert im n-α-System,
korr. Normkern, α aus Variationsrechnung

Abb. III-13



sich der Verlauf der Eigenfunktionen und die Eigenwerte nicht mehr stark ändern dürfen. Die Genauigkeit der erhaltenen Eigenwerte bei unseren Rechnungen dürfte in der Größenordnung von 0.01 liegen. Abb. III-13 zeigt das Konvergenzverhalten eines Eigenzustands im n-α-Normkern.

Für die Auswertung einer derart hohen Anzahl Schätzwerte war im α-α-Fall eine Rechenzeit von ca. einem Tag CPU auf der zur Verfügung stehenden Rechenanlage vom Typ UNIVAC 1100/80 nötig. Es ist also offensichtlich, daß eine Erweiterung des Ansatzes auf noch kompliziertere Systeme sehr rasch an Grenzen stößt, so daß Näherungsmethoden zur Berechnung der korrelierten Normkerne nötig werden.

b) α-α-Fall

Tabelle III-1 vergleicht die Eigenwertspektren des α-α-Normkerns für vier verschiedene Fälle:

a) Unkorrelierter Normkern im harmonischen Oszillator-Grenzfall mit einem Oszillatorweiteparameter von 0.566 fm^{-2} entsprechend dem literaturüblichen rms-Radius für das α-Teilchen.

b) Korrelierter Normkern mit α-Teilchen nach Gl. (III-14):

$$\Phi_{\alpha} = \prod_{i<j} f(r_{ij})\, \Phi_{\alpha}^{h.o.} = F_{int}\, \Phi_{\alpha}^{h.o.}$$

Abweichend von den übrigen Rechnungen wurde hier die Anpaßenergie ε in Gl. (III-5) zu 0.1 MeV anstatt 10 MeV gewählt, um einen tieferen Bindungszustand für das α-Teilchen zu erzielen. Um den literaturüblichen rms-Radius von 1.41 fm zu reproduzieren, wurde der Weiteparameter zu 0.584 fm^{-2} gewählt.

c) Korrelierter Normkern mit "realistischem" α-Teilchen aus der Variationsrechnung /35/.

d) Unkorrelierter Normkern für α-Teilchen aus der Variationsrechnung /35/.

Tabelle III-1

Bedeutendste Normkerneigenwerte im α-α-System

l	Schaetzw. (10^6)	Dim. Basis	Eigenwerte			
Oszillator-Grenzfall						
0	---	---	1.00	1.00	0.25	
2	---	---		1.00	0.25	
4	---	---			0.25	
korrelierter Normkern, α mit inneren Korrelationen						
0	5.54	16	1.007	0.999	0.22	-0.14
2	2.99	10		1.014	0.22	-0.12
4	3.86	10			0.22	-0.10
korrelierter Normkern, α aus Variationsrechnung						
0	4.76	16	1.00	0.96	0.19	-0.15
2	4.60	16		0.97	0.19	-0.14
4	3.66	16			0.20	-0.10
unkorrelierter Normkern, α aus Variationsrechnung						
0	4.76	16	0.99	0.88	0.23	
2	4.60	16		0.89	0.23	
4	3.66	16			0.23	

Nach den Oberlegungen in Kapitel III.1.c sollte die Anzahl der völlig Pauli-verbotenen Zustände in den Fällen a) und b) gleich sein, d.h. im Fall b) sollten zwei Eigenzustände mit dem Eigenwert 1 in der s-Welle und einer in der d-Welle auftreten. Daß dies mit sehr hoher Genauigkeit der Fall ist, spricht für die Qualität und Zuverlässigkeit des numerischen Verfahrens, die in unserer Rechnung erreicht wurde.

Eine weitere wichtige Beobachtung ist, daß sich am Eigenwertspektrum zwischen a) und b) nur wenig ändert. Die bedeutsamste Abweichung ist das Auftreten von Zuständen mit negativem Eigenwert. Die in der Tabelle angegebenen Zustände mit negativem Eigenwert sind nur diejenigen, die sich am deutlichsten heraushoben, in jeder Partialwelle treten noch weitere auf, die aufgrund ihrer betragsmäßig kleinen Eigenwerte jedoch nicht ausreichend genau bestimmt werden konnten.

Abb. III-14 zeigt einen Vergleich der radialen Wellenfunktionen für die Fälle a) und b) bei $l = 0$. Wie man sieht, ähneln sich nicht nur die Eigenwertspektren, sondern auch die Eigenzustände. Die beiden entarteten Zustände wurden im Fall a) so kombiniert, daß ein möglichst guter Oberlapp mit den entsprechenden Zuständen aus Fall b) erreicht wurde.

Der neu hinzugekommene Zustand mit negativem Eigenwert ist im Ortsraum sehr eng; er reicht nicht über das Überlappungsgebiet der Cluster hinaus und ähnelt von der Form her den Zuständen aus der Oszillatorbasis kaum. Wie ein Blick in Tabelle III-1 zeigt, stammt er allein von den Korrelationen, nicht von der geänderten Gestalt des α-Teilchens, da er in Fall d) nicht auftritt. In Anhang III wird sein Auftreten durch eine analytische Oberlegung begründet.

Vergleicht man nun den Fall c) mit dem Normkern im harmonischen Oszillator-Grenzfall, so stellt man fest, daß auch hier die Eigenwertspektren nicht stark voneinander abweichen. Allerdings werden die völlig Pauli-verbotenen Zustände zu nahezu verbotenen, was nicht weiter verwunderlich ist, da es ja keine analytische Begründung dafür gibt, daß in diesem Falle weiterhin völlig verbotene Zustände auftreten müssen. Auch hier treten wieder Zustände mit negativem Eigenwert auf.

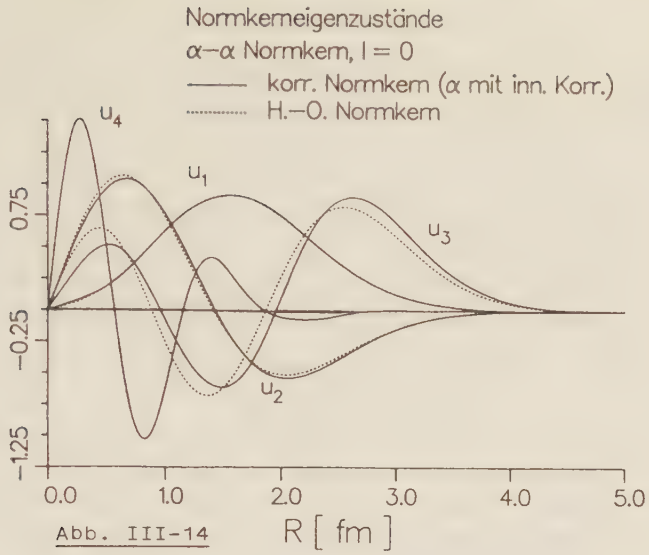


Abb. III-14

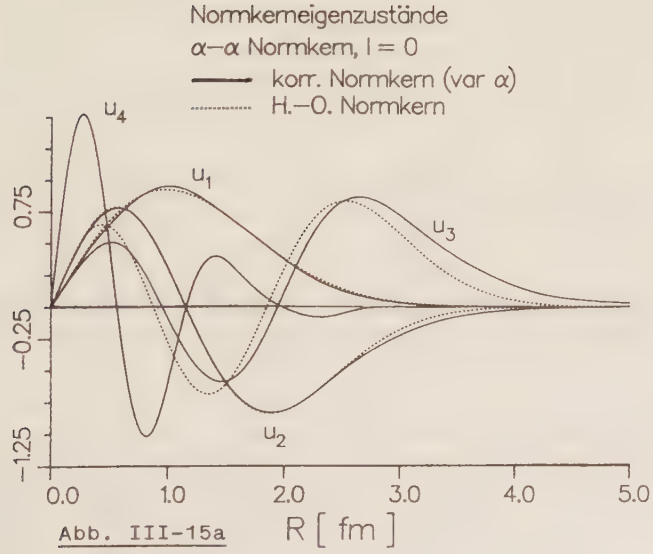


Abb. III-15a

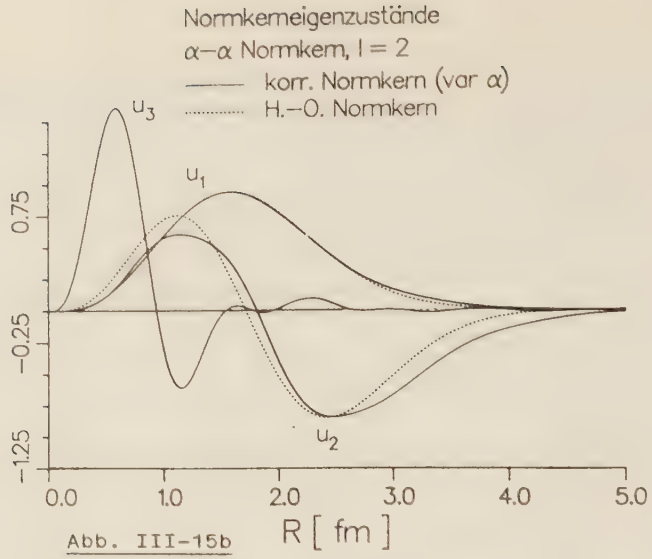


Abb. III-15b

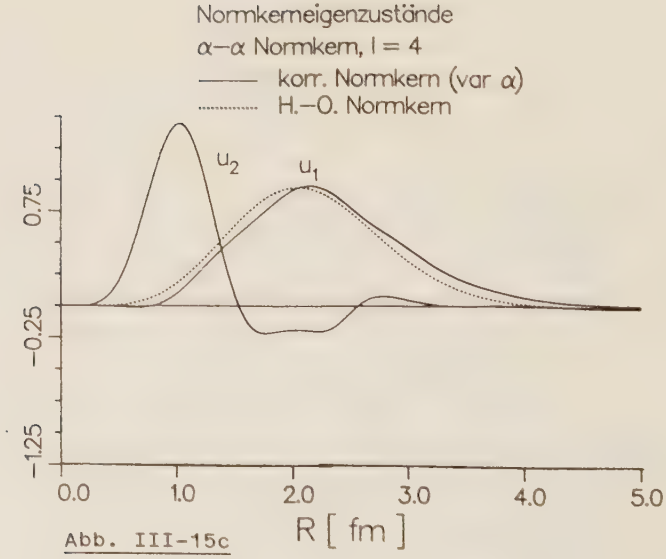


Abb. III-15c

Abb. III-15a zeigt, daß die Eigenzustände für die s-Welle wiederum nicht allzu stark vom Oszillator-Limes abweichen, und Abb. III-15b und III-15c zeigen dasselbe für die d- und die g-Welle. Wie man am "buckligen" Verlauf der Wellenfunktionen sieht, ist für l = 4 allerdings die erzielte numerische Genauigkeit noch nicht sehr groß. Da die Drehimpulsbarriere hier aber schon in 3 fm Abstand über 20 MeV ausmacht, hat der Normkern bei l=4 ohnehin nur noch eine geringe Auswirkung auf die Gesamtwechselwirkung.

Die große Ähnlichkeit der Normkerneigenzustände und -eigenwerte zwischen einem Oszillator-α-Teilchen und einem so stark vom Oszillator-Grenzfall abweichenden α-Teilchen wie dem aus der Variationsrechnung /35/ ist auch deshalb bedeutsam, da Normkerne bisher meist nur für Grundzustände aus Oszillatorfunktionen berechnet wurden, was den wahren Grundzuständen normalerweise nicht sehr nahe kommt. Man kann in dem Ergebnis also eine Rechtfertigung für die Verwendung des Oszillator-Grenzfalls in der Resonating Group-Theorie sehen.

c) n-α-Fall

Tab. III-2 gibt die wichtigsten Eigenwerte des n-α Normkerns für den Oszillator-Grenzfall und den korrelierten Normkern entsprechend den Fällen b) und c) aus dem vorigen Abschnitt wieder. Man sieht, daß sich die Spektren wiederum in den groben Zügen entsprechen.

In der s-Welle treten mit Korrelationen wieder Zustände mit negativem Eiegnwert auf, in der p-Welle haben die Zustände auch ohne Korrelationen negative Eigenwerte.

Abb. III-16a und III-17 zeigen einen Vergleich der Radialfunktionen für den Oszillatornormkern und den korrelierten Normkern mit dem α-Teilchen aus der Variationsrechnung /35/. Auch hier fällt wiederum die starke Ähnlichkeit der meisten Eigenzustände auf; es handelt sich also nicht um eine spezielle Eigenschaft des α-α-Normkerns.

Der zweite Eigenzustand in der p-Welle entspricht offensichtlich den "engen" Eigenzuständen mit negativem Eigenwert in der s-Welle und im α-α-Problem.

Tabelle III-2

Bedeutendste Normkerneigenwerte im n-α-System

l	Schätzw. (10^6)	Dim. Basis	Eigenwerte		
Oszillator-Grenzfall					
0	---	---	1.00	0.06	
1	---	---		-0.25	
korrelierter Normkern, α mit inneren Korrelationen					
0	1.97	10	0.999	0.06	-0.05
1	1.96	10		-0.25	-0.04
korrelierter Normkern, α aus Variationsrechnung					
0	1.72	20	0.99	0.050	-0.053
1	0.92	20		-0.25	-0.04
unkorrelierter Normkern, α aus Variationsrechnung					
0	1.72	20	0.94	0.06	
1	0.92	20		-0.23	

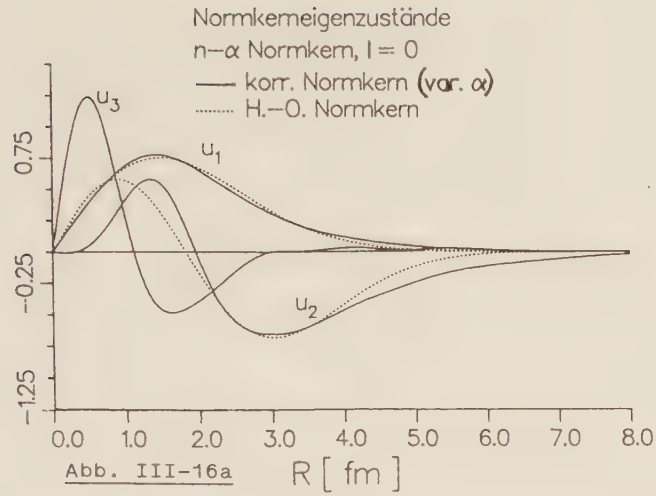


Abb. III-16a

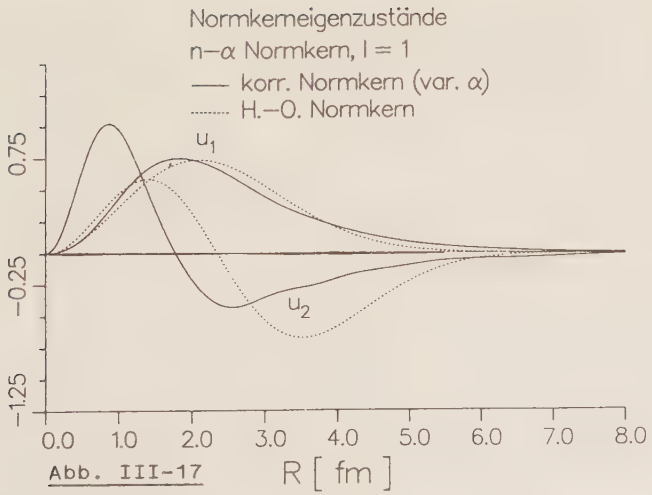


Abb. III-17

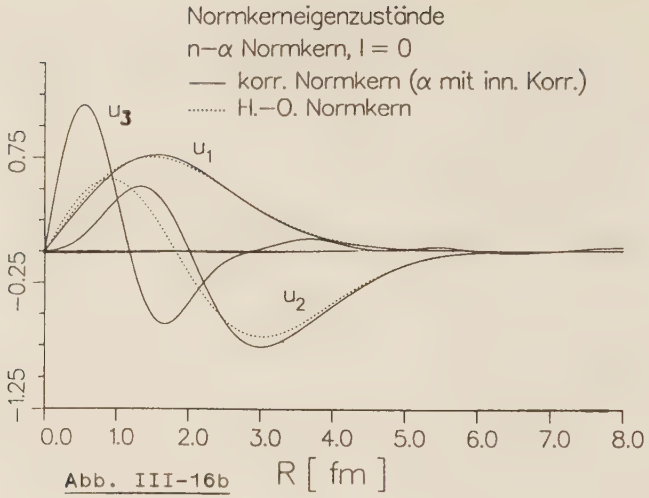


Abb. III-16b

Man beachte, daß die in Abb. III-14 bis III-17 gezeichneten Radialfunktionen gegenüber den wirklichen Eigenfunktionen definitionsgemäß einen zusätzlichen Faktor R in der Amplitude tragen, d. h. die Steigung am Ursprung entspricht der Amplitude der Eigenfunktion am Ursprung.

Allerdings weicht die Gestalt des zweiten (nach unserem Numerierungsschema im Fall c) eigentlich dritten) Eigenzustands beim korrelierten Normkern in der s-Welle recht deutlich vom Oszillator-Grenzfall ab. Der langsame Anstieg nahe dem Ursprung erklärt sich vermutlich aus der Orthogonalität zu dem Zustand mit negativem Eigenwert, der ebenfalls eingezeichnet ist; dieser Zustand steigt recht schnell an.

Auffälliger ist jedoch das unterschiedliche asymptotische Verhalten: der zweite (bzw. dritte) Zustand geht beim korrelierten Normkern mit dem α-Teilchen aus der Variationsrechnung sehr viel langsamer gegen 0 als im Oszillator-Grenzfall. Dies dürfte ein Effekt der unterschiedlichen Grundzustandswellenfunktionen sein: Für große Nukleonenabstände hat ein Oszillator-α-Teilchen einen Abfall der Nukleonen-Aufenthaltswahrscheinlichkeit wie eine Gauß-Funktion, während das α-Teilchen aus der Variationsrechnung einen - physikalisch sinnvolleren - Exponentialabfall aufweist. Dasselbe Verhalten müssen auch die Normkerne für große Werte von R' bzw. R'' aufweisen.

In unserem Beispiel tritt der Unterschied besonders deutlich beim zweiten (bzw. dritten) Eigenzustand in Erscheinung. Dieser Zustand läßt sich auch nicht befriedigend durch Oberlagerung von zwei oder drei Oszillatorfunktionen beschreiben; Beiträge von der zweiten bis zur siebten Oszillatorfunktion sind für die Beschreibung wesentlich. Bei genauerer Betrachtung findet man das unterschiedliche asymptotische Verhalten auch beim ersten Eigenzustand.

Daß das asymptotische Verhalten wirklich aus der Asymptotik der α-Wellenfunktion kommt, zeigt Abb. III-16b: Die Radialfunktionen für die Eigenzustände des korrelierten Normkerns mit dem einfachen α-Teilchen nach Gl. (III-14), das im Außenbereich einem Oszillator-α-Teilchen gleicht, haben auch dasselbe asymptotische Verhalten wie die Oszillator-Zustände. Für die Testrechnung mit dem einfacheren α-Teilchen wurde nur eine Funktionenbasis von 10 anstatt 20 Oszillatorfunktionen genommen, weshalb der Zustand mit negativem Eigenwert nicht gut dargestellt werden kann und im Außenbereich etwas zu wellig ist.

Der Grund, warum dieser Unterschied im asymptotischen Verhalten beim α-α-Problem nicht offensichtlich wurde, ist, daß hier beide beteiligten Cluster zusammengesetzt sind: Nach einem Nukleonenaustausch über große Clusterabstände hinweg befinden sich beide getauschten Nukleonen in einem Bereich, wo die Wellenfunktion des Clusters rasch abfällt. Zwar hat der Normkern für ein α-Teilchen mit physikalisch sinnvollem asymptotischen Verhalten der Nukleonendichte auch im α-α-System einen exponentiellen Abfall für große Clusterabstände, doch macht dieser nur einen geringen Teil am gesamten Normkern aus. Allgemein erwarten wir daher einen wesentlichen Unterschied in den Normkerneigenzuständen nur in Systemen Nukleon-Cluster; bei zwei zusammengesetzten Clustern spielt der Unterschied in der Asymptotik keine so große Rolle. Bei genauem Hinsehen kann man jedoch auch im α-α-System die Unterschiede im asymptotischen Verhalten beobachten (vgl. Abb. III-15).

d) Schlußfolgerungen aus beiden Beispielen

Der korrelierte Normkern und der Normkern im Oszillator-Grenzfall sind sich in den Systemen n-α und α-α sehr ähnlich.

Die wesentlichsten Unterschiede sind:

- Beim korrelierten Normkern mit einem einigermaßen realistischen α-Teilchen treten anstelle der völlig Pauli-verbotenen Zustände mit dem Eigenwert 1 nahezu verbotene mit etwas geringerem Eigenwert auf. Nach den Überlegungen in Kapitel II.4 dürfte dies bei leichten Systemen keine großen Unterschiede in den Observablen verursachen, so daß die nahezu verbotenen Zustände in Streuphasenberechnungen wie völlig verbotene behandelt werden können.
- Beim korrelierten Normkern treten in allen Partialwellen Zustände mit negativem Eigenwert auf. Sie sind in ihrer räumlichen Ausdehnung sehr eng, haben normalerweise einen geringeren rms-Radius als der tiefste Zustand des Oszillatornormkerns und mehrere Nullstellen. Sie lassen sich nur durch Überlagerung einer großen Anzahl von Oszillatorzuständen darstellen.

Ihr Einfluß auf die Observablen des Streuproblems dürfte normalerweise gering sein: aufgrund der engen räumlichen Ausdehnung und ihrer Nullstellen ist ihr Oberlapp mit der Streuwelle bei allen physikalisch relevanten Energien recht klein. Der Erwartungswert des Hamilton-Operators für den Zustand mit negativem Eigenwert aus Tab. III-1 ergibt für die s-Welle im α-α-Problem ca. 240 MeV; erst bei Energien in diesem Bereich ist ein guter Oberlapp mit der Streuwelle zu erwarten. Für das n-α-Problem liegt der entsprechende Wert bei ca. 160 MeV.

Die Frage, inwieweit für solche Zustände mit negativem Eigenwert die Behandlung durch das optische Fischgrätenmodell noch sinnvoll ist, hat demgemäß also wenig praktische Bedeutung; aus dem Ansatz des optischen Fischgrätenmodells für die Wechselwirkung zwischen den Clustern läßt sie sich nicht ohne weiteres beantworten.

- Da die Wellenfunktion des α-Teilchens aus der Variationsrechnung für große Nukleonenabstände langsamer abfällt als für das Oszillator-α-Teilchen, fällt auch der Betrag des Normkerns für große Clusterabstände langsamer ab. Dies hat bei einigen Eigenzuständen zur Folge, daß ihre Radialfunktionen für große Abstände ebenfalls weitaus langsamer abfallen. Der Unterschied ist besonders deutlich, wenn nur eines der beiden Cluster zusammengesetzt ist, d.h. bei uns im n-α-Fall. Inwieweit dies die Streudaten beeinflußt, können wir am besten durch den Fit selbst beurteilen.

Abgesehen vom dritten Punkt spricht die große Ähnlichkeit der beiden Normkerne somit dafür, daß man ohne besondere Bedenken in Streuphasenrechnungen als Ersatz für den nur mit hohem Aufwand berechenbaren korrelierten Normkern den Oszillator-Normkern verwenden könnte. Dies ist umso bedeutsamer, als nach den Überlegungen in Kap. III.2.d unsere Wahl der Korrelationsfunktion sich physikalisch nicht sehr gut begründen läßt. Die große Ähnlichkeit zum Normkern des harmonischen Oszillator-Grenzfalls rechtfertigt aber die Hoffnung, daß die Details der Korrelationsfunktion für die Gesamtwechselwirkung keine besonders große Rolle spielen.

Dennoch wäre es sinnvoll, eine Näherung für den korrelierten Normkern zu finden, die über den Oszillator-Grenzfall hinausgeht und wenigstens die Eigenzustände zu negativen Eigenwerten enthält. Im Anhang IV wird eine solche Näherung diskutiert und an einem Beispiel mit dem korrelierten Normkern verglichen.

4. Gesamtwechselwirkung; Vergleich mit dem Experiment

a) Definition der Fitting-Parameter

Mit dem Normkern und dem Direktpotential besitzen wir nun alle Ingredienzen für die Aufstellung der Bewegungsgleichung des optischen Fischgrätenmodells und für einen Vergleich mit den experimentellen Streudaten.

Nach der Grundidee des optischen Fischgrätenmodells müssen wir in das aus unseren Faltungsrechnungen erhaltene Direktpotential Fitting-Parameter einführen, um die experimentellen Ergebnisse zu reproduzieren.

Die einzelnen Beiträge zum Faltungspotential stammen aus einer numerischen Rechnung und liegen nicht in einer analytischen Form vor; um uns nicht auf eine bestimmte Parametrisierung für unser Direkpotential festzulegen, wollen wir beim Fitting direkt mit den numerisch berechneten Potentialen arbeiten.

Damit verbleiben uns zwei einfache und einsichtige Weisen, unser Potential zu modifizieren:

- durch die Transformation

$$V(r) = f_1 V_{start}(r) \qquad \text{(III-24)}$$

können wir die Tiefe,

- durch

$$V(r) = V_{start}(f_2 r) \qquad \text{(III-25)}$$

die Weite des Potentials variieren.

Indem wir die Variation jeweils getrennt für den attraktiven Anteil V_f/J und den repulsiven Anteil W/J durchführen, stehen uns somit insgesamt 4 Fitting-Parameter zur Verfügung.

Nach den Überlegungen in Kap. II.5 und III.2.d müssen wir in der Tiefe mit starken Variationen rechnen und Werte zwischen etwa 0.375 und 1 für f_1 können im Rahmen unseres Fits als sinnvoll angesehen werden. Die Variation der Weite ist demgegenüber stärker eingeschränkt, da die Reichweite unserer

gefalteten Potentiale bereits durch die Weite des α-Teilchens und die Reichweite des Nukleon-Nukleon-Potentials bzw. der Korrelationen vorgegeben ist. Physikalisch sinnvoll ist also nur eine geringfügige Variation der Weite. Wir wollen deshalb in allen Rechnungen zunächst versuchen, ohne Weitevariationen auszukommen.

Der Oberflächenanzierhungsterm U wird in den folgenden Rechnungen ganz vernachlässigt. Der Grund dafür ist, daß wegen der geringen Tiefe von U unsere Streudaten überhaupt nur bei drastischen Stärkeänderungen von U reagieren werden. Solche drastischen Veränderungen lassen sich aus unserem Ansatz aber nicht begründen; U wäre dann nur noch ein rein phänomenologisches Potential.

b) Das α-α-Problem

Im Streusystem α-α spielen vor allem die Partialwellen mit l = 0,2 und 4 eine Rolle für die elastischen Wirkungsquerschnitte unterhalb der Aufbruchsschwelle. Ungerade Bahndrehimpulse treten nicht auf, da die α-Teilchen sich wie identische Bosonen verhalten.

Die experimentell ermittelten Streuphasen stammen aus drei verschiedenen Quellen /39, 40, 41/ und sind nicht vollständig miteinander verträglich. Beim Fit wurde Wert darauf gelegt, daß die errechneten Streuphasen mit allen drei Quellen möglichst gut verträglich sind. Die Daten für die Anpassung der sehr scharfen Resonanz in der s-Welle bei 92 keV (^{8}Be-Grundzustand) stammen aus /41/.

Das elektrostatische Potential zwischen den α-Teilchen wurde angenommen zu

$$V_c(r) = \frac{4\,e^2}{r}\,\mathrm{erf}(\lambda r)\,,\quad \lambda = 0.6019\ \mathrm{fm}^{-1}\ . \qquad \text{(III-26}$$

Als ein erster Versuch zur Anpassung der theoretischen an die experimentellen Streuquerschnitte wurde ein Fit mit nur einem Parameter versucht. Die Stärke von V_f/J und W/J wurde dazu mit demselben Faktor multipliziert.

Eine gemeinsame Potentialstärke für die Anpassung von allen drei relevanten Partialwellen gleichzeitig konnte nicht gefunden werden. Wie man aus Tab. III-3 entnehmen kann, lagen die Unterschiede zwischen den Partialwellen jedoch in der Größenordnung von wenigen Prozent.

Um die Empfindlichkeit der Ergebnisse auf die genaue Wahl der Normkerneigenzustände zu testen, wurde sowohl mit dem Normkern im harmonischen Oszillator-Grenzfall mit einem Weiteparameter von .566 fm^{-2} gerechnet, als auch mit dem numerisch gefundenen korrelierten Normkern für das α-Teilchen aus der Variationsrechnung /35/. Beim korrelierten Normkern wurde für die beinahe verbotenen Zustände das Orthogonalitätsprinzip angewandt; ihre Eigenwerte wurden also künstlich zu 1 gesetzt.

Bei der Streuphasenberechnung wurden jeweils die in Tabelle III-1 verzeichneten Eigenzustände berücksichtigt. Man sieht aus Tabelle III-3, daß die Potentialparameter für den Bestfit von der Wahl des Normkerns nur wenig abhängig sind. Der Einfluß der Zustände mit negativem Eigenwert auf die Streuphase ist somit, wie in Kap. III.2.d vorhergesagt, tatsächlich nur gering. Daß die Qualität der Übereinstimmung mit den experimentellen Streuphasen ebenfalls in der gleichen Größenordnung liegt, zeigen Abb. III-18a und III-18b.

Insbesondere in der s-Welle läßt die Qualität des Fits für höhere Energien aber durchaus noch Wünsche offen. Als nächster Schritt wurden deshalb die Tiefen von V_f/J und W/J einzeln variiert, so daß das Potential zwei Fitting-Parameter besitzt. Auch hier gelang es nicht, alle Partialwellen mit einem einzigen Parametersatz anzupassen. Hat man jedoch V_f/J und W/J für die s-Welle bestimmt, so genügt es, das Verhältnis der beiden unverändert zu lassen und die Stärke wiederum gemeinsam zu variieren. Abb. III-18c zeigt, daß durch die getrennte

Tabelle III-3

Fitparameter für α-α-System

	Faktor für Potentialstärke		Faktor für Weiteparam.	
	V_f/J	W/J	Normkern	
1parametriges Potential, Oszillator-Normkern				
l = 0	0.4283		1.00	
l = 2	0.4174		1.00	
l = 4	0.4015		1.00	per
1parametriges Potential, korrelierter Normkern				defi-
l = 0	0.4179		1.00	
l = 2	0.4056		1.00	nitio-
l = 4	0.3967		1.00	
				nem
2parametriges Potential, korrelierter Normkern				
	0.4590	0.5627	1.00	
l = 0	* 1.000			
l = 2	* 0.966			
l = 4	* 0.929			
3parametriges Potential, korrelierter Normkern				
l = 0, 2, 4	0.4120	0.4527	1.1075	

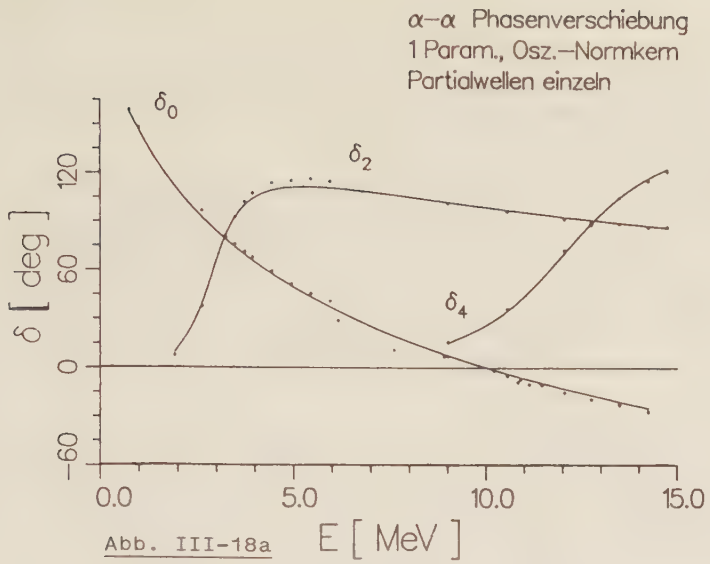


Abb. III-18a

Die Punkte geben experimentelle Werte an.

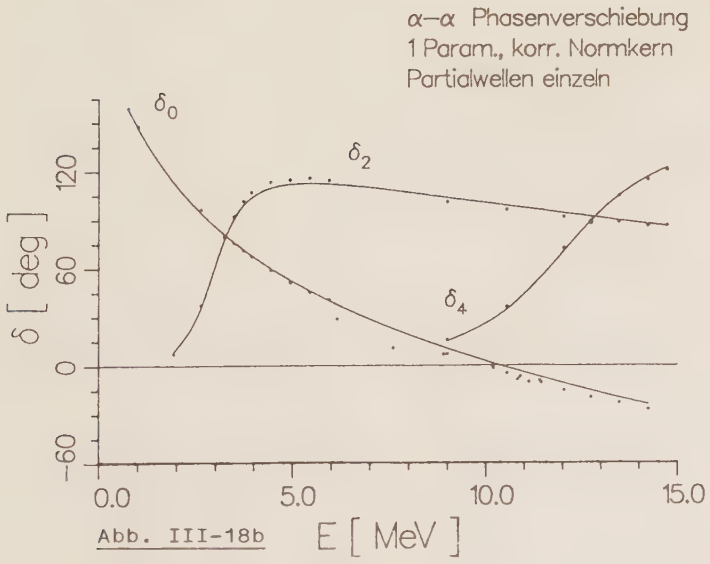


Abb. III-18b

Variation der Stärke von V_f/J und W/J die s-Welle tatsächlich deutlich besser wiedergegeben wird.

Nach der Diskussion in Kapitel III.2.d wäre zu erwarten, daß der Stärkeparameter f_1 am Punkt des besten Fits für V_f/J nahe bei 0.375 liegen dürfte, da es auf einer mikroskopischen Serber-Kraft basiert. Für den repulsiven Teil wird ein Stärkeparameter erwartet, der näher bei 0.75 liegt. Die Werte in Tabelle III-3 bestätigen diese Vermutung in den Grundzügen.

Die Drehimpulsabhängigkeit unseres Direktpotentials ist etwas unangenehm. Ein Versuch, durch zusätzliche Variation der Potentialweite eine gleichzeitige Anpassung für alle drei Partialwellen zu erhalten, führt zu einem beinahe völligen Verschwinden des repulsiven Anteils, wenn man sich dem Punkt des besten Fits nähert. Dies stimmt mit früheren Ergebnissen /28/überein. Bei einer Wertung dieser Tatsache muß man jedoch berücksichtigen, daß ein ähnliches Problem auch aus der Resonating Group-Theorie bekannt ist: verwendet man ein Nukleon-Nukleon-Potential einfacher Form, so benötigt man für jede Partialwelle einen unterschiedlichen Mischungsparameter für die Austauschmischung, was ebenfalls zu unterschiedlich starken Direktpotentialen führt (vgl. z.B. /4/). Die Richtung der Änderung ist in beiden Rechnungen allerdings unterschiedlich: in /4/ war das Direktpotential für höhere Drehimpulse stärker, in der vorliegenden Rechnung ist es schwächer.

Eine brauchbare Anpassung für alle drei Partialwellen gleichzeitig erwies sich jedoch als möglich, wenn auch der Weiteparameter für die Oszillatorbasis des Normkerns verändert wurde. Der beste Fit ergab sich bei einem um ca. 10% höheren Weiteparameter, was einer Verringerung des rms-Radius für das α-Teilchen um ca. 5% entspricht. Offensichtlich erzeugt der Normkern ohne Weiteveränderung etwas zu viel Repulsion in der s-Welle. Eine ähnliche Modifikation des Weiteparameters wurde auch in der Resonating Group-Rechnung /4/ angewandt. Sie lag betragsmäßig noch etwas höher, war aber in der Richtung wiederum entgegengesetzt. Bei moderneren Resonating Group-Rechnungen konnten solche Probleme allerdings vermieden werden /42/.

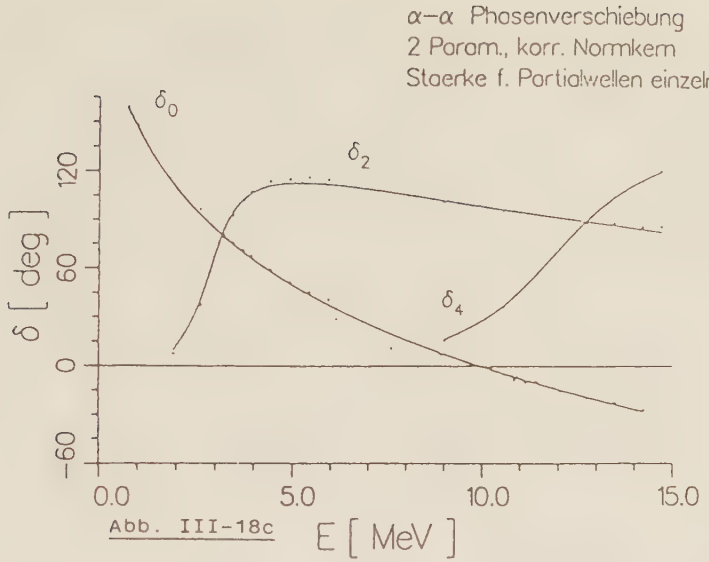


Abb. III-18c

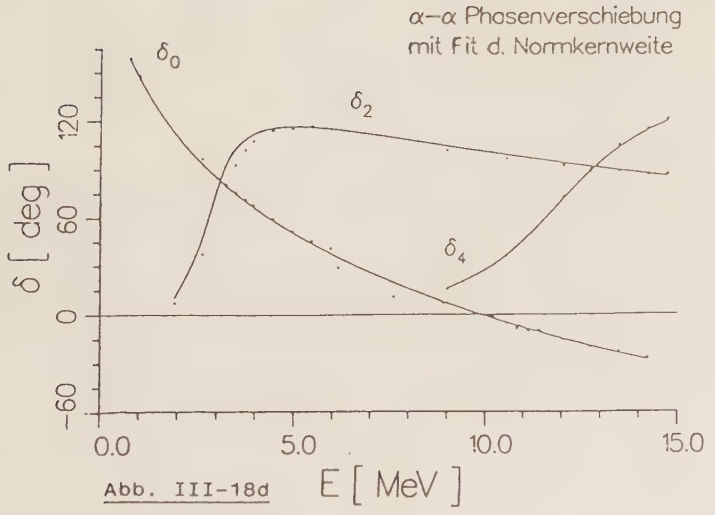


Abb. III-18d

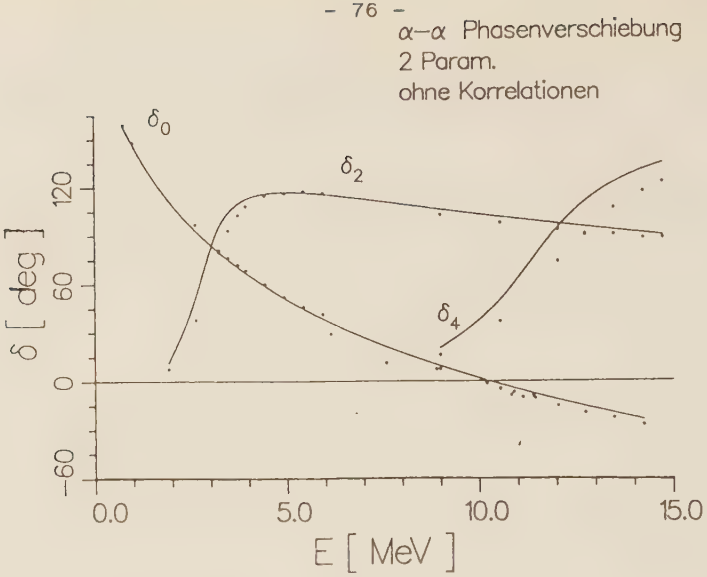


Abb. III-18e

Resultat eines Phasenfits mit dem gewöhnlichen optischen Fischgrätenmodell ohne Korrelationen

Es fällt auf, daß die Resonanzenergien der d- und der g-Welle nicht sonderlich gut reproduziert werden. Während dies in /43/ für die g-Welle ebenfalls zutraf, ist die Diskrepanz in der d-Welle größtenteils darauf zurückzuführen, daß in /43/ nahe der Resonanz etwas andere Streuphasen verwendet wurden.

Bei allen Fits wurde zusätzlich zu den hier gezeichneten Streuphasen auch Wert auf möglichst Reproduktion der 92 keV-Resonanz (^{8}Be-Grundzustand) gelegt; die Abweichungen in der Resonanzenergie liegen normalerweise in der Größenordnung von maximal einigen 100 eV.

Abb. III-19 zeigt einen Vergleich der mit den verschiedenen Methoden angepaßten Direktpotentiale untereinander und mit dem Resultat eines Fits nach dem gewöhnlichen Fischgräten-modell ohne Korrelationen /43/. Man sieht, daß insbesondere das Potential mit der unabhängigen Variation für attraktiven und repulsiven Anteil, das die Streudaten besonders gut wiedergibt, im Innenbereich deutlich weniger attraktiv ist als das Gauß-Potential nach dem gewöhnlichen optischen Fisch-grätenmodell. Allerdings bleibt auch das hier gefundene Potential bis zu verschwindendem Clusterabstand hin attraktiv. Nach der Untersuchung /14/ scheint es aber wahrscheinlich, daß eine Sättigung für Systeme mit mehr als zwei α-Clustern nur mit einem α-α-Direktpotential erreicht werden kann, das am Ursprung verschwindet oder repulsiv wirkt, wenn zwischen den Clustern keine Drei-Körper-Kräfte wirken. Repulsive, aus den Korrelationen folgende Drei-Körper-Kräfte, wurden in der Untersuchung /17/ am System ${}^{6}_{\Lambda\Lambda}\mathrm{He}$ tatsächlich aufge-funden; die Bindungsenergie des Systems wurde durch sie um ca. 0.5 MeV reduziert.

Abb. III-20 zeigt einen Vergleich der radialen Wellenfunktionen für das Potential nach der alten Rechnung aus /43/ und dem durch zwei Parameter gefitteten Potential aus dieser Unter-suchung für $l = 0$ und $E = 3$ MeV. Man sieht, daß die radiale Wellenfunktion für kurze Abstände durch die Orthogonalitäts-bedingung dominiert wird, die ihr zwei Knotenpunkte im Überlappungsgebiet der Kerne vorschreibt. Die Unterschiede in der Amplitude der Wellenfunktionen für kurze Abstände spiegeln die Tatsache wieder, daß die beiden Potential zwar nahezu dieselben Streuphasen liefern, also on shell-äquivalent sind, jedoch ein unterschiedliches off shell-Verhalten zeigen. Die etwas geringere Höhe der Amplitude im Nahbereich für das Potential mit Korrelationen läßt sich somit als ein durch die geringere Attraktion des Direktpotentials hervor-gerufener Sättigungseffekt interpretieren.

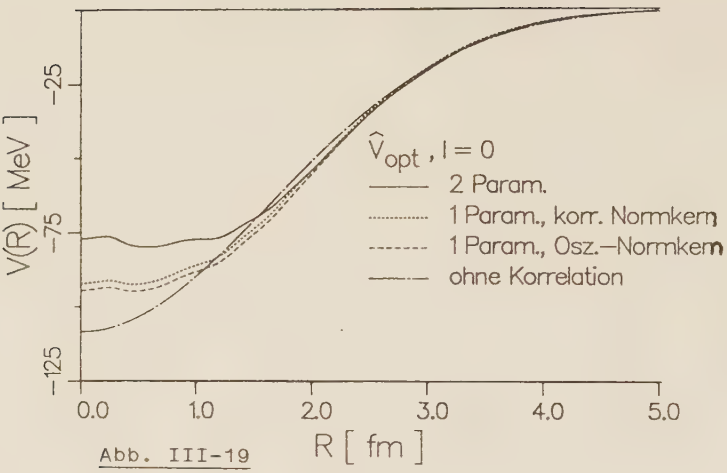


Abb. III-19

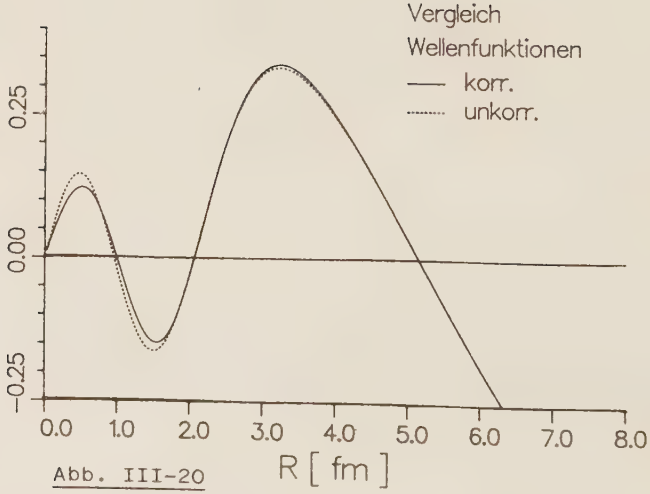


Abb. III-20

Abb. III-21

Versch. Parametrisierungen
fuer $\hat{V}_{opt}$
ohne
Gauss
Woods–Saxon
V(R) [MeV]
-25
-75
-125
0.0
1.0
2.0
3.0
4.0
5.0
R [fm]

Um zu einem analytischen Ausdruck für $\hat{V}_{eff}$ zu gelangen, kann man versuchen, V_f/J und W/J durch Gauß- oder Woods-Saxon-Potentiale zu approximieren. Dabei ist eine Reproduktion der Potentialform zwischen 2 und 4 fm wichtiger als am Ursprung, da der Bereich um den Ursprung wenig zum Volumenintegral beiträgt.

Bei einer Parametrisierung mit der Gauß-Form (III-7)

$$V(r) = - V_0 \, e^{-\gamma r^2}$$

ergaben sich die Parameter

$$V_0 = 466.21 \text{ MeV} \quad , \quad \gamma = 0.23677 \text{ fm}^{-2} \quad \text{für } V_f/J$$

und

$$V_0 = -238.50 \text{ MeV} \quad , \quad \gamma = 0.38098 \text{ fm}^{-2} \quad \text{für } W/J \, .$$

Mit der Woods-Saxon-Form

$$V(r) = - V_0 \, / \, (1 + \exp(\frac{r-R}{a})) \qquad \text{(III-27)}$$

ergaben sich die Parameter

$$V_0 = 504.22 \text{ MeV} \, , \quad R = 1.6345 \text{ fm} \, , \quad a = 0.63926 \text{ fm} \quad \text{für } V_f/J$$

und

$$V_0 = -249.85 \text{ MeV} \, , \quad R = 1.3221 \text{ fm} \, , \quad a = 0.49632 \text{ fm} \quad \text{für } W/J.$$

Für beide analytischen Potentialformen wurde durch getrennte Variation der Stärke von V_f/J und W/J ein Fit an die s-Wellen-Streudaten durchgeführt. Er unterschied sich sowohl in der Qualität als auch im Endresultat für die Potentialstärken nur wenig von dem Fit für das rein numerisch berechnete Potential. Ein Vergleich der drei gefitteten Potentiale wird in Abb. III-21 gegeben.

c) Das n-α-Problem

Das System n-α eignet sich naturgemäß weniger für einen Vergleich mit dem Experiment als das α-α-System, da bei der n-α-Streuung effektive Spin-Bahn-Kräfte auftreten, die in unserer Rechnung

fehlen, weil das verwendete Nukleon-Nukleon-Potential weder Spin-Bahn- noch Tensor-Kräfte enthält.

Deshalb wurde zum errechneten n-α-Potential ein phänomenologischer Spin-Bahn-Term hinzuaddiert. Das optische Potential $\hat{V}_{opt}$ wurde gewählt zu

$$\hat{V}_{opt} = f_1 \left(1 + a \vec{l} \cdot \vec{s} \right) \frac{V_f}{J} + f_2 \frac{W}{J} \qquad \text{(III-28)}$$

Das Spin-Bahn-Potential ist also dem attraktiven Teil des Faltungspotentials proportional. Wurde versucht, auch in den repulsiven Teil eine Spin-Bahn-Kraft einzubringen, so war ein guter Fit der theoretischen Streuphasen an die experimentellen Daten unmöglich oder konnte nur durch Wegdriften der übrigen Potentialparameter in von unserem Ansatz her nicht erklärbare Größenordnungen erkauft werden. Da der Korrelationsfaktor F schon von seinem Ansatz her keine Spin-Bahn- oder Tensor-Anteile enthalten kann (vgl. hierzu die Diskussion in Kap. III.2.d), ist dieses Ergebnis im Rahmen unseres Formalismus begrüßenswert.

Die Proportionalität zu V_f/J wurde gewählt, um nicht eine Differentiation dieser nur numerisch bekannten Funktion ausführen zu müssen. Dies ist jedoch keine allzu bedeutende Abweichung von der üblichen phänomenologischen Gestalt $\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}$, da sich V_f/J näherungsweise durch eine Gauß-Funktion beschreiben läßt, und für diese sind die beiden Terme einander proportional.

Unser optisches Direktpotential enthält also drei Parameter, von denen der dritte die Stärke für einen phänomenologischen Spin-Bahn-Term wiedergibt. Auf eine Weitevariation verzichten wir wieder.

Für die n-α-Streuung bei Energien unterhalb der Aufbruchschwelle sind die Partialwellen s1/2, p1/2 und p3/2 bedeutsam. Die experimentellen Streuphasen wurden aus der sehr genauen Analyse /44/ entnommen.

Setzt man für den Normkern den des harmonischen Oszillators ein, so ist mit diesen drei Parametern ein Fit an alle drei Streuphasen gleichzeitig ohne besondere Mühe möglich (vgl. Abb. III-22)

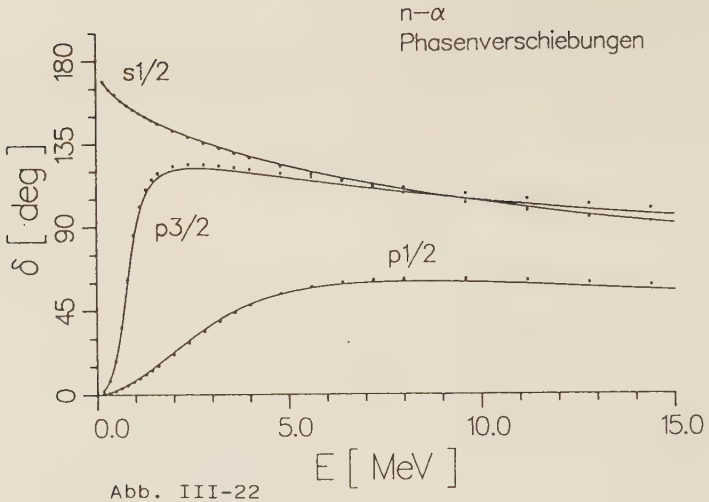


Abb. III-22

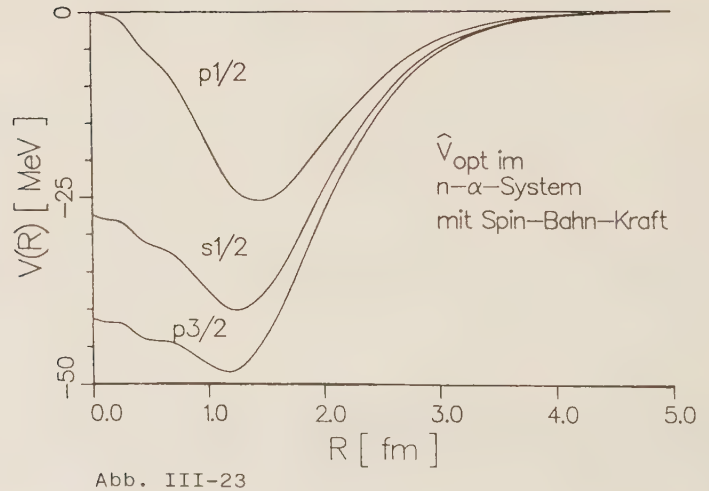


Abb. III-23

Dies ändert sich völlig, sobald man den Normkern mit Korrelationen und einem α-Teilchen aus der Variationsrechnung /35/ gemäß Kapitel III.3.c einsetzt: ein guter Fit wird nicht mehr erreicht, und die Potentialparameter wandern zu Größenordnungen, die von unserem Ansatz her nicht verständlich sind. Eine nähere Untersuchung des Problems zeigt, daß die Gestalt der Streuphasenkurve für die s-Welle nicht mehr richtig wiedergegeben wird. Den Hauptbeitrag zu der Diskrepanz liefert der sehr langreichweitige zweite (bzw. dritte, vgl. Kap. III.3.c) Eigenzustand des Normkerns in der s-Welle. Läßt man ihn weg, verschwindet die Diskrepanz weitgehend, wenn auch immer noch ein gewisser Unterschied bleibt. Es ist zunächst erstaunlich, daß ein Eigenzustand, dessen Eigenwert nur ca. 0.05 beträgt, die Streudaten so stark beeinflussen kann. Die Erklärung liegt vermutlich in der großen Reichweite des Zustands im Ortsraum: er hat auch in einem Abstand von 6 fm noch keine verschwindende Amplitude. Die nichtlokale Wechselwirkung hat also eine größere Reichweite als das Direktpotential. Eine analytische Behandlung des n-α-Problems für den Oszillatorgrenzfall (vgl. z.B. /4/ und die Diskussion in Anhang I) zeigt aber, daß wesentliche Beiträge zur nichtlokalen Wechselwirkung in der Resonating Group-Theorie eine deutlich geringere Reichweite haben als der Normkern selbst. Das optische Fischgrätenmodell kann diese Eigenschaft hier ganz offensichtlich nicht in einem ausreichenden Maße reproduzieren, da es den nichtlokalen Wechselwirkungsanteil allein aus Normkern und Direktpotential bestimmt. Bei einem α-Teilchen, das im Außenbereich wie eine Gauß-Funktion abfällt, macht dieser Unterschied offensichtlich nicht viel aus, bei einem realistischeren α-Teilchen mit Exponentialabfall wirkt er sich dagegen drastischer aus. Nach den Ergebnissen im vorigen Abschnitt über die α-α-Streuung und den Oberlegungen in Kapitel III.3.c sollte das Problem aber nur auftreten, wenn eines der beiden beteiligten "Cluster" ein Nukleon ist. Sind beide Cluster zusammengesetzte Teilchen, so wird die Reichweite der Normkerneigenzustände auch für einen Exponentialabfall der Nukleonendichte nicht wesentlich größer als im Oszillatorgrenzfall.

Wie erwartet, verschwindet das Problem denn auch, wenn man den korrelierten Normkern mit dem einfachen α-Teilchen nach Gl. (III-14) verwendet; auf einen genaueren Fit mit diesem Normkern wurde verzichtet, da er zu Testzwecken nur in einer kleineren Zustandsbasis bestimmt wurde.

In Abb. III-22 werden die Streuphasenkurven für den Fit mit dem Oszillator-Normkern mit dem Experiment verglichen. Abgesehen von dem Problem mit dem dritten Normkern-Eigenzustand bei l=0 ist unser Formalismus mit einer phänomenologischen Spin-Bahn-Kraft also auch für das n-α-System anwendbar; ein guter Fit läßt sich mit 3 Parametern realisieren.

Die Werte für die Potentialparameter am Punkt des Bestfits sind

$$\begin{aligned} f_1 &= 0.5779, \\ f_2 &= 0.6287, \\ a &= 0.1050\ \hbar^{-2}\ . \end{aligned} \qquad \text{(III-29)}$$

Abb. III-23 zeigt die Potentialformen für die verschiedenen Partialwellen. Obwohl der Spin-Bahn-Term maximal etwa 20 % des attraktiven Faltungspotentials ausmacht, sind sie sehr verschieden. Der Grund dafür ist die weitgehende Auslöschung des attraktiven Potentials durch den repulsiven Term W/J für kurze Cluster-Abstände. Ähnlich starke Unterschiede traten auch bei einem Fit mit dem konventionellen optischen Fischgrätenmodell auf /20/.

Auffällig an den Potentialparametern (III-31) ist, daß V_d/J und W/J nahezu denselben Stärkeparameter f besitzen und daß dieser deutlich über dem für eine Serber-Kraft zu erwartenden Wert von 0.375 liegt. Ähnlich auffällige Abweichungen wurden jedoch auch schon in Resonating Group-Rechnungen mit einfachen Nukleon-Nukleon-Potentialen beobachtet (vgl. z.B. /4/, aber auch /42/).

IV. Zusammenfassung und Ausblick

Ausgehend vom optischen Fischgrätenmodell wurde ein Formalismus näher untersucht, der bei der Streuung zusammengesetzter Atomkerne in einer effektiven Wechselwirkung sowohl das Pauli-Prinzip als auch die kurzreichweitigen Korrelationen zwischen den Nukleonen berücksichtigt.

Die Wechselwirkung enthält einen lokalen Anteil, der sich aus zwei Hauptbeiträgen zusammensetzt. Ein normalerweise attraktiver Term resultiert aus der Faltung des Nukleon-Nukleon-Potentials mit einer Korrelationsfunktion und den Nukleonendichten der Grundzustände der beteiligten Kerne. Ein repulsiver Beitrag gibt die zusätzliche kinetische Energie wieder, die durch die Korrelationen erzeugt wird. Der lokale Anteil der Wechselwirkung wird mit Fitting-Parametern versehen, um die experimentellen Streudaten zu reproduzieren. Die Hauptschwierigkeit bei der Bestimmung der Startparameter für den lokalen Anteil liegt darin, daß die Behandlung einer Austauschmischung in der Nukleon-Nukleon-Kraft im Rahmen des optischen Fischgrätenmodells nicht auf eine eindeutige Weise möglich ist.

Ein nichtlokaler Anteil der Wechselwirkung benötigt als Input bei seiner Berechnung den lokalen Anteil sowie Eigenzustände und Eigenwerte des korrelierten Normkerns, der eine Verallgemeinerung des bekannten Normkern-Operators aus der Resonating Group-Methode darstellt.

Die verschiedenen Anteile zur Wechselwirkung wurden für die Systeme n-α und α-α berechnet. Als Nukleon-Nukleon-Kraft wurde ein Potential mit hard core, aber ohne Spin-Bahn- und Tensor-Terme verwendet. Zur Berechnung der für die Faltungen notwendigen Integrale wurde eine Quasi-Zufalls-Zahlen-Methode verwendet, die schneller als die übliche Monte Carlo-Methode konvergiert.

Die Berechnung des korrelierten Normkerns wurde mit Grundzuständen ausgeführt, die stark von den einfachen Oszillatorzuständen abweichen, die in der Resonating Group-Theorie meist

verwendet werden. Die Abweichungen im Normkernspektrum waren jedoch nicht sehr bedeutend, was man als zusätzliche Rechtfertigung für die Verwendung des Oszillator-Grenzfalls ansehen kann.

Es gelang, die experimentellen Streudaten der Systeme α-α und n-α durch Einführung von zwei bzw. drei Fitting-Parametern zu reproduzieren. Dabei wurde die Reichweite der durch Faltung erhaltenen Potentiale nicht verändert. Im α-α-Fall mußte allerdings jede Partialwelle einzeln angepaßt werden. Im n-α-Fall gibt der dritte Parameter die Stärke einer phänomenologischen Spin-Bahn-Kraft wieder.

Der für die α-α-Streuung ermittelte lokale Anteil der Kraft ist nahe dem Ursprung deutlich weniger attraktiv als ein Direktpotential, das im Rahmen des optischen Fischgrätenmodells ohne Korrelationen verwendet wurde. Der Unterschied reicht aber vermutlich nicht ganz aus, um in Systemen aus mehr als zwei α-Clustern einen Kollaps des zusammengesetzten Kerns zu verhindern. Aus den Korrelationen resultierende Drei-Körper-Kräfte, wie sie bei einer Untersuchung des ${}^{6}_{\Lambda\Lambda}$He-Systems gefunden wurden /17/, sind demnach wesentlich zum Verständnis von Drei- und Mehr-Cluster-Systemen.

Ziel der Arbeit war es zu untersuchen, inwieweit es der Formalismus des optischen Fischgrätenmodells mit Korrelationen erlaubt, in einen phänomenologischen Ansatz für die Wechselwirkung zusammengesetzter Kerne die durch die Nukleon-Nukleon-Korrelationen erzeugte Repulsion einzubringen. In den beiden untersuchten Systemen war die Weite des repulsiven Anteils der lokalen Wechselwirkung im wesentlichen durch die räumliche Ausdehnung des Überlappungsgebietes der beiden Cluster gegeben, während die Tiefe als Fitting-Parameter angesehen werden konnte. Damit ist es nun möglich, auch für schwerere Systeme Potentialformen anzugeben, welche die Repulsion in den lokalen Anteil der Wechselwirkung einbringen, ohne die umständlichen Faltungsrechnungen aus dieser Arbeit zu wiederholen. Das optische Fischgrätenmodell erlaubt es somit, phänomenologische Wechselwirkungen zwischen zusammengesetzten Kernen aufzustellen, die das Pauli-Prinzip und die kurzreichweitigen Nukleon-Nukleon-Korrelationen berücksich-

tigen, wobei die einzelnen Beiträge zur Gesamtwechselwirkung sich physikalisch interpretieren lassen.

Die erwähnten Schwierigkeiten bei der Definition des Direktpotentials und Probleme mit dem asymptotischen Verhalten des nichtlokalen Anteils der Wechselwirkung im n-α-System machen es allerdings wünschenswert, die Beziehungen zwischen den Gesamtwechselwirkungen des Resonating Group-Modells und des optischen Fischgrätenmodells bei Auftreten kurzreichweitiger Nukleon-Nukleon-Korrelationen näher zu untersuchen. Die in dieser Arbeit verwendete Integrationsmethode ist flexibel und effizient genug, um die notwendigen Faltungsrechnungen auch für den nichtlokalen Anteil der Resonating Group-Wechselwirkung durchzuführen. Eine solche Untersuchung wäre zwar sehr rechenzeitaufwendig, doch durchaus realisierbar.

Anhang I

Einfluß kurzreichweitiger Anteile in der Nukleon-Nukleon-Kraft auf die Struktur der Resonating Group-Bewegungsgleichung

Wir wollen uns im folgenden mit einem bestimmten Beitrag zur Austauschwechselwirkung in der Resonating Group-Theorie auseinandersetzen, der sich vom Hauptteil der Wechselwirkung nach Gl. (II-10) nicht ausreichend reproduzieren läßt, wenn die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung Anteile mit sehr kurzer Reichweite enthält.

Wir bezeichnen im folgenden die Nukleonen des ersten Clusters mit 1, 2, ... , N, die des zweiten Clusters mit 1', 2' , ... , N' . Nukleonenaustausch zwischen den beiden Clustern wollen wir mit (i j') symbolisieren, also z. B. (1 1') .

Wir untersuchen den Ein-Teilchen-Austauschterm und beschränken dazu auf die Vertauschung (1 1'), da wir die Cluster als intern bereits antisymmetrisch ansehen. Zunächst wollen wir auch eine rein l o k a l e Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung v(r) beschränken.

Von den verschiedenen Beiträgen zur Gesamtwechselwirkung interessiert uns zunächst der Anteil von $v_{11'}$; wir wollen also das Matrixelement

$$F_{11'} = \langle \phi_1 \phi_2 \vec{R}' | (1\,1')\ v_{11'} | \phi_1 \phi_2 \vec{R}'' \rangle \qquad \text{(A I-1)}$$

berechnen.

Die Vektoren $\vec{R}'$ und $\vec{R}''$ geben die Abstände der Cluster-Schwerpunkte vor bzw. nach dem Austausch wieder, d. h.

$$\vec{R}' = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + .. + \vec{r}_N}{N} - \frac{\vec{r}_{1'} + \vec{r}_{2'} + .. + \vec{r}_{N'}}{N'} , \qquad \text{(A I-2a)}$$

$$\vec{R}'' = \frac{\vec{r}_{1'} + \vec{r}_2 + .. + \vec{r}_N}{N} - \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_{2'} + .. + \vec{r}_{N'}}{N'} . \qquad \text{(A I-2b)}$$

Es folgt:

$$\vec{r}_1 - \vec{r}_{1'} = \frac{N N'}{N + N'} (\vec{R}' - \vec{R}'') . \qquad \text{(A I-3)}$$

Dies bedeutet, daß sich $v_{11'}$ allein in Abhängigkeit von $\vec{R}'$ und $\vec{R}''$ schreiben läßt und somit aus dem Integral herausgezogen werden kann.

Insgesamt gibt es N×N' solcher Terme in der Austauschwechselwirkung; wir fassen sie zusammen und führen die Bezeichnungen

$$K_1(\vec{R}', \vec{R}'') = N N' < \phi_1\phi_2\vec{R}' \mid (1\,1') \mid \phi_1\phi_2\vec{R}'' > \qquad \text{(A I-4a)}$$

$$V_a(\vec{R}', \vec{R}'') = N N' < \phi_1\phi_2\vec{R}' \mid (1\,1')\, v_{11'} \mid \phi_1\phi_2\vec{R}'' > =$$

$$= v\left(\frac{N N' (\vec{R}' - \vec{R}'')}{N + N'}\right) K_1(\vec{R}', \vec{R}'') \qquad \text{(A I-4b)}$$

ein. $K_1(\vec{R}', \vec{R}'')$ ist der Ein-Teilchen-Austauschterm des Normkerns.

Betrachten wir nun eine Nukleon-Nukleon-Kraft mit kurzreichweitigen Anteilen und als Grenzfall wieder eine Kontaktkraft (II-35)

$$v_c(r) = \delta(r) \quad ,$$

so sehen wir sofort, daß V_a zu einer lokalen Wechselwirkung wird:

$$V_a(\vec{R}', \vec{R}'') = \delta\left(\frac{N N' (\vec{R}' - \vec{R}'')}{N + N'}\right) K_1(\vec{R}', \vec{R}'') =$$

$$= \delta(\vec{R}' - \vec{R}'')\, V_{a,c}(\vec{R}') \qquad \text{(A I-5)}$$

Die Stärke von $V_{a,c}$ können wir etwas genauer bestimmen, wenn wir bedenken, daß ja gerade die Teilchen ausgetauscht werden, die dank der δ-Funktion in der Kraft am gleichen Ort sein müssen:

$$\delta(\vec{R}' - \vec{R}'')\, V_{a,c}(\vec{R}') = N N' < \phi_1\phi_2\vec{R}' \mid (1\,1')\, v_{c,11'} \mid \phi_1\phi_2\vec{R}'' > =$$

$$= N N' < \phi_1\phi_2\vec{R}' \mid P^{\sigma}_{11'} P^{\tau}_{11'} v_{c,11'} \mid \phi_1\phi_2\vec{R}'' > \quad . \qquad \text{(A I-6)}$$

Für die Systeme n-α und α-α mit völlig raumsymmetrischem α-Teilchen kann der Spin-Isospin-Austausch leicht ausgewertet werden, und es folgt:

$$V_{a,c} = < \phi_1\phi_2 \mid P^{\sigma}_{11'} P^{\tau}_{11'} \mid \phi_1\phi_2 > V_{f,c}(\vec{R}') = 1/4\; V_{f,c}(\vec{R}') \qquad \text{(A I-6a)}$$

Ersetzt man v_c durch die Kontaktkraft mit der zusätzlichen Projektion auf antisymmetrische Spin-Isospin-Zustände v'_c

nach Gl. (II-38), so ergibt sich

$$V'_{a,c} = 1/2 < \phi_1\phi_2 \,|\, (P^{\sigma}_{11'} P^{\tau}_{11'} - 1)| \,\phi_1\phi_2 > V_{f,c}(\vec{R}') = \qquad \text{(A I-6b)}$$

$$= - 6/16\, V_{f,c}(\vec{R}') = - V'_{f,c}(\vec{R}') \quad ,$$

wie man sich leicht durch Auswerten der entsprechenden Spin-Isospin-Austausch-Matrixelemente überzeugen kann.

Definiert man eine Reichweite der Nichtlokalität, etwa durch

$$\overline{r}^2(\vec{R}) = \frac{\int d^3\rho\, V_a(\vec{R}+\vec{\rho}/2, \vec{R}-\vec{\rho}/2)\, \rho^2}{\int d^3\rho\, V_a(\vec{R}+\vec{\rho}/2, \vec{R}-\vec{\rho}/2)} \quad , \qquad \text{(A I-7)}$$

und sieht sich Gl. (A I-4) an, so stellt man fest, daß V_a für kurzreichweitige Anteile der Nukleon-Nukleon-Kraft ein Term mit sehr "enger", d. h. kurzreichweitiger Nichtlokalität wird und somit durch eine lokale Kraft approximiert werden kann. Dies ist die Basis für die Einbeziehung des Terms in das optische Direktpotential, wie sie in Kapitel II.5 vorgeschlagen wird. Die Untersuchungen /21/, bei denen eine gute Übereinstimmung zwischen Relativwellenfunktionen nach dem Resonating Group-Modell und dem optischen Fischgrätenmodell auch in Fällen festgestellt wurde, wo die Restwechselwirkung nach Gl. (II-10) durchaus nicht mehr vernachlässigbar ist, deuten darauf hin, daß das optische Potential auf diese Weise tatsächlich einen bedeutenden Teil der Restwechselwirkung in sich aufnehmen kann.

Eine verfeinerte Behandlung dieses Terms, die zu einer Modifikation des optischen Fischgrätenmodell führt, wird in Anhang IV vorgeschlagen.

Anhang II

Anwendung der Quasi-Zufallszahlen-Methode von Richtmyer und Haselgrove auf das vorliegende Problem

Die Quasi-Zufallszahlen-Methode von Richtmyer und Haselgrove, im folgenden als QRN bezeichnet, wurde zum ersten Mal von der Arbeitsgruppe um H. Tanaka auf kernphysikalische Probleme angewendet /32/ .

Die Methode dient zur Berechnung eines Integrals

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \cdots \int_0^1 dx_1\, dx_2 \cdots dx_n\, f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \quad . \qquad \text{(A II-1)}$$

Der Integrand muß also gegebenenfalls so transformiert werden, daß das ursprüngliche Integrationsgebiet auf das N-dimensionale Intervall zwischen 0 und 1 abgebildet wird.

Die Integration wird mit einer Hilfsfunktion g durchgeführt, die auf ganz $\mathbb{R}^N$ definiert ist, so daß

(i) $g(x_1, x_2, \ldots, x_N) = f(x_1, x_2, \ldots, x_N)$
für alle $0 < x_i < 1$, (A II-2)

(ii) $g(x_1+2m_1, x_2+2m_2, \ldots, x_N+2m_N) = g(x_1, x_2, \ldots, x_N)$
für beliebige ganzzahlige m_i und reelle x_i ,

(iii) $g(x_1, x_2, \ldots, x_N) = g(|x_1|, |x_2|, \ldots, |x_N|)$
für beliebige relle x_i ,

(iv) g ist überall nach allen Richtungen zweimal stetig partiell partiell differenzierbar und es gilt:

$$\left| \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \cdots \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} g \right| < M \quad .$$

Forderungen (i) bis (iii) lassen sich offensichtlich für jede auf dem N-dimensionalen Intervall zwischen 0 und 1 definierte Funktion erfüllen; für Forderung (iv) muß m i n d e s t e n s f dieselbe Forderung erfüllen.

Unter diesen Voraussetzungen konnten Ritchmyer und Haselgrove zeigen:
Wählt man einen Satz i r r a t i o n a l e r Zahlen a_i und bildet die Summe

$$S_n^{(1)} = \sum_{m=-n}^{n} g(ma_1, ma_2, \ldots, ma_n) \quad , \qquad \text{(A II-3)}$$

so konvergiert $S_n^{(1)}/(2n+1)$ wie $1/n$ gegen den Wert des Integrals (A II-1) .
Die Summe $S_n^{(2)}$ wird definiert durch

$$S_n^{(2)} = \sum_{m=0}^{n} S_m^{(1)} \quad , \qquad \text{(A II-4)}$$

und $S_n^{(2)}/(n+1)^2$ konvergiert sogar wie $1/n^2$ gegen den Integralwert.

Will man die QRN-Methode zur Berechnung von $\hat{v}_{eff}$ nach Gl. (II-27) einsetzen, so sieht man sofort, daß bei der Auswertung von (II-23b)

$$W(\vec{R}') \, \delta(\vec{R}' - \vec{R}'') = \frac{\hbar^2}{2M} < \Phi_1 \Phi_2 \vec{R}' | \sum_i (\nabla_i F)^2 | \Phi_1 \Phi_2 \vec{R}'' >$$

der Integrand unstetig ist, wenn die Teilchenkoordinaten für Teilchen aus verschiedenen Clustern so liegen, daß

$$| \vec{r}_i - \vec{r}_j | = r_c \quad . \qquad \text{(A II-5)}$$

Er kann also Bedingung (iv) unmöglich erfüllen.

Die Untersuchungen /32/ von Tanaka und Nagata deuten allerdings darauf hin, daß auch unstetige Funktionen mit endlicher Sprungstelle mit QRN berechnet werden können, wobei die Konvergenz immer noch besser ist als mit der Monte Carlo-Methode. Wegen der Bedeutung der Frage wurde dies nochmals überprüft. Als Integranden wurden Funktionen

$$f_k(\vec{x}) = \begin{cases} (1 - |\vec{x}|^k)^k & , \text{wenn } |\vec{x}| < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad \text{(A II-6)}$$

gewählt. f_0 definieren wir durch den Grenzwert $k \to +0$, d. h. $f_0(\vec{x}) = 1$ für $|\vec{x}| < 1$.

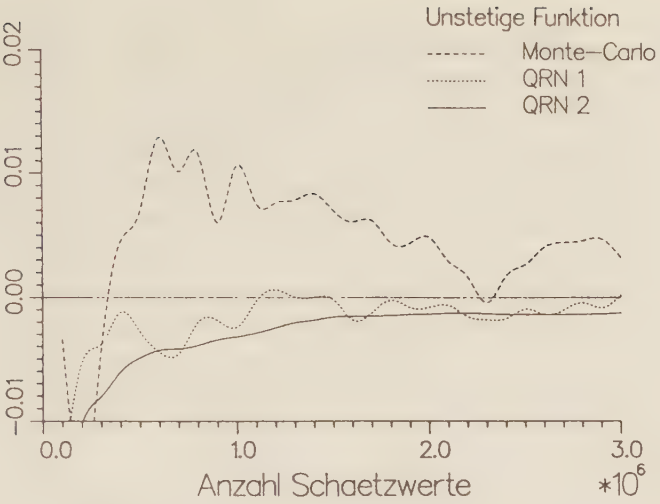


Abb. A II-1

Konvergenztest für f_o

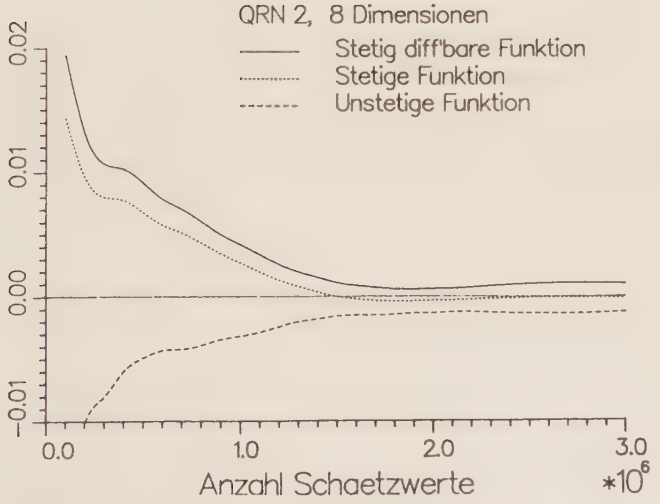


Abb. A II-2

Konvergenzvergleich für f_o, f_1, f_2

Angegeben sind jeweils relative Fehler

f_0 ist bei $|\vec{x}| = 1$ unstetig, f_1 ist stetig, f_2 stetig differenzierbar. Das Integral über f_i auf dem N-dimensionalen Intervall zwischen O und 1 wurde für N = 2, 4, 8 jeweils mit der QRN-Methode sowohl mit Einfachsummation (QRN1) als auch mit Doppelsummation (QRN2) und mit der Monte-Carlo-Methode berechnet. In allen Fällen erwies sich QRN der Monte-Carlo-Methode überlegen. Allerdings war die Konvergenz der unstetigen Funktion f_0 deutlich schlechter als die Konvergenz von f_1 und f_2 . Abb. A II-1 zeigt einen Vergleich der Konvergenz für f_0 mit den drei verschiedenen Integrationsmethoden bei N = 8. Angegeben ist jeweils der relative Fehler des Integrals. Abb. A II-2 zeigt einen Konvergenzvergleich für f_0, f_1 und f_2 bei N = 8 für die QRN-Methode mit Doppelsummation.

Das Konvergenzverhalten für $\hat{V}_{eff}$ wurde, um Rechenzeit zu sparen, für den Clusterabstand O untersucht; da hier sowohl V_f/J als auch W/J groß sind, wirken die in Kapitel III.2.a besprochenen Aufhebungseffekte besonders stark, so daß die Konvergenz hier besonders langsam erfolgen sollte. Abb. A II-3a und -3b zeigen das Konvergenzverhalten für die Systeme n-α und α-α .

Die Konvergenz des korrelierten Normkerns erscheint demgegenüber weniger kritisch, da hier die Unstetigkeitsstelle beim hard core-Radius nicht auftritt, weil der Integrand keine Ableitungen der Korrelationsfunktion enthält. Kriterien zum Test der Konvergenz werden in Kap. III.3.a besprochen.

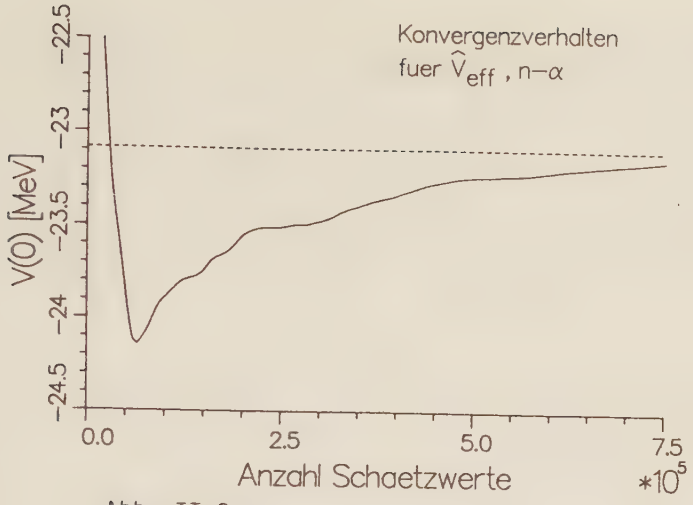


Abb. II-3a

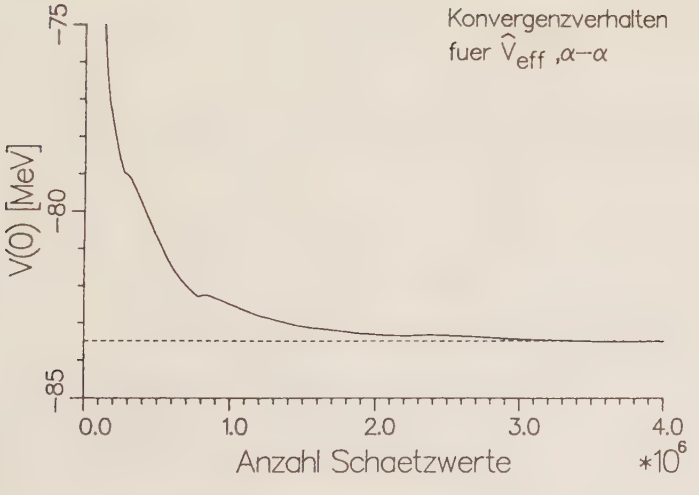


Abb. II-3b

Anhang III

Begründung für das Auftreten negativer Eigenwerte beim korrelierten Normkern

Um uns klarzumachen, warum wir in allen untersuchten Systemen und Partialwellen für den korrelierten Normkern Eigenzustände mit negativen Eigenwerten gefunden haben, wollen wir uns zunächst mit dem gewöhnlichen unkorrelierten Normkern befassen.

Bekanntlich gehen in allen leichten Systemen die Eigenwerte des Normkerns sehr rasch gegen O, wenn man sie der Größe nach ordnet. Sieht man sich die niedrigsten Eigenzustände mit nahezu verschwindenden Eigenwerten an, stellt man aber fest, daß sie im Überlappungsgebiet der beiden Cluster, wo auch der Normkern deutlich von O verschieden ist, keineswegs eine verschwindende Amplitude besitzen (vgl. z. B. /25/) .

Da aber die Beziehung

$$K|u\rangle \approx 0 \quad \Leftrightarrow \quad \int d^3R'' \, K(\vec{R}', \vec{R}'') \, u(\vec{R}'') \approx 0 \qquad \text{(A III-1)}$$

erfüllt wird, aus der auch

$$\int d^3R' \, d^3R'' \, K(\vec{R}', \vec{R}'') \, u(\vec{R}') \, u(\vec{R}'') \approx 0 \qquad \text{(A III-1a)}$$

folgt, kann dies nur daran liegen, daß bei der Integration positive und negative Beiträge auftreten, die sich gegenseitig nahezu völlig wegheben.

Wir betrachten jetzt den Ein-Teilchen-Austauschterm des Normkerns und übernehmen dazu die Bezeichnungen aus Anhang I, d. h. den Ein-Teilchen-Austauschterm bezeichnen wir wieder mit $K_1(\vec{R}', \vec{R}'')$.

In den von uns untersuchten Systemen ist $K_1(\vec{R}', \vec{R}'')$ im Oszillatorgrenzfall stets positiv; diese Eigenschaft bleibt bestehen, solange die innere Wellenfunktion des α-Teilchens keinen Vorzeichenwechsel aufweist.

Es folgt, daß auch $K_1(\vec{R}',\vec{R}'')\, u(\vec{R}')\, u(\vec{R}'')$ in der Umgebung der Geraden $\vec{R}' = \vec{R}''$ eine positive Größe ist. Da u in der Nähe des Ursprungs rasch oszilliert, wird ein Großteil der positiven Beiträge zum Integral (A III-1a) aus dem Bereich unmittelbar um die Gerade $\vec{R}' = \vec{R}''$ kommen.

Vergleichen wir nun die Ausdrücke für den unkorrelierten und den korrelierten Normkern. Nach (II-9) und (II-28) gilt:

$$K(\vec{R}', \vec{R}'') = \langle \Phi_1\Phi_2\vec{R}' \,|\, \mathcal{A}'_{ext} \,|\, \Phi_1\Phi_2\vec{R}'' \rangle ,$$

$$\hat{K}(\vec{R}', \vec{R}'') = J^{-1/2}(\vec{R}') \langle \Phi_1\Phi_2\vec{R}' \,|\, F\, \mathcal{A}'_{ext}\, F \,|\, \Phi_1\Phi_2\vec{R}'' \rangle J^{-1/2}(\vec{R}'') .$$

Nehmen wir für F die übliche Jastrow-Form (II-15)

$$F = \prod_{i\in\Phi_1, j\in\Phi_2} f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

an, so sehen wir, daß auf beiden Seiten des Antisymmetrtisators ein Faktor $f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_{1'}|)$ steht. Beim Ein-Teilchen-Austauschterm gilt nach (A I-3) :

$$f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_{1'}|) = f\left(\frac{N N' (|\vec{R}' - \vec{R}''|)}{N + N'}\right) , \qquad \text{(A III-2)}$$

so daß wir die Faktoren vor das Integral ziehen können.

Da f ja bei uns die hard core-Korrelationen enthält, folgt:

$$\hat{K}_1(\vec{R}',\vec{R}'') = 0, \text{ wenn } |\vec{R}' - \vec{R}''| < \frac{N + N'}{N N'} r_c \quad \text{(A III-3)}$$

Oben haben wir aber gesehen, daß gerade das Gebiet um die Gerade $\vec{R}' = \vec{R}''$ wesentlich für die positiven Beiträge zu $\langle u|\hat{K}|u\rangle$ ist. Dieses Argument wird erst ungültig, wenn u so rasch oszilliert, daß es innerhalb des ausgeschlossenen Bereichs in der Regel das Vorzeichen wechselt, was bei den untersuchten Systemen Energien von vielen 100 MeV erfordert. Einen ähnlich selektiven Ausschließungs-mechanismus für negative Beiträge können wir aus unseren Überlegungen nicht ableiten.

Wir folgern, daß der Erwartungswert für $\hat{K}$ mit u negativ ist. Da $\hat{K}$ hermitesch ist, folgt daraus auch die Existenz negativer Eigenwerte. Da unser Argument auch noch für recht hoch angeregte Zustände der Relativbewegung gültig bleibt, ist auch geklärt, warum die entsprechenden Eigenzustände noch nennenswerte Beiträge von Oszillatorfunktionen mit mehr als 20 Oszillatorquanten Anregung enthalten.

Anhang IV

Reichweitenkorrektur für das optische Fischgrätenmodell

In Anhang I konnte ein großer Teil der Restwechselwirkung für kurzreichweitige Nukleon-Nukleon-Kräfte auf einen bestimmten Anteil der Austauschwechselwirkung in der Resonating Group-Theorie zurückgeführt werden. Außerdem wurde gezeigt, wie dies grob im optischen Fischgrätenmodell durch Wahl eines geeigneten Startpotentials für die Fitting-Prozedur berücksichtigt werden kann (Kap. II.5) . Allerdings mußte dabei eine Fallunterscheidung zwischen kurz- und langreichweitigen Nukleon-Nukleon-Kräften gemacht werden.

Hier soll ein verfeinertes optisches Fischgrätenmodell vorgeschlagen werden, das folgende Forderungen erfüllt:

1. Für sehr kurzreichweitige Potentiale soll es die Erkenntnisse aus Anhang I berücksichtigen. Insbesondere soll für eine Kontaktkraft der richtige lokale Anteil an der Gesamtwechselwirkung entsprechend dem Resonating Group-Modell folgen.
2. Unabhängig von der Natur der Nukleon-Nukleon-Kraft soll das Saito'sche Orthogonalitätsprinzip stets befolgt werden.
3. Für sehr langreichweitige Kernkräfte soll es in das gewöhnliche optische Fischgrätenmodell übergehen, da dann die Restwechselwirkung nach Gl. (II-10) beliebig klein wird.

Wir beschränken uns zunächst wieder auf eine rein lokale Nukleon-Nukleon-Kraft, d. h. eine vom Wigner-Typ.

Punkte 1. und 2. können wir leicht durch Vorgabe eines (normalerweise nichtlokalen) Startpotentials für die Fitting-Prozedur erfüllen:

$$V_{start} = V_f(\vec{R}') \, \delta(\vec{R}' - \vec{R}'') - V_a(\vec{R}', \vec{R}'') \quad . \qquad \text{(A IV-1)}$$

Vergleichen wir mit (A I-5) und (A I-6) , so stellen wir fest, daß diese Vorgabe für eine Kontaktkraft gerade mit der Wahl des Startpotentials (II-41) identisch wird.

Um zu verhindern, daß wir an den nichtlokalen Anteilen ein Fitting durchführen müssen, schreiben wir die Gesamtwechselwirkung so um, daß der zweite Term in (A IV-1) durch eine Modifikation der M_{ij} ersetzt wird. Wir erreichen dies mit

$$M_{ij} \to M_{ij}^V = M_{ij} + (1 - M_{ij}) \, \frac{\langle u_i \mid V_a \mid u_j \rangle}{\langle u_i \mid V_f \mid u_j \rangle} \quad , \qquad \text{(A IV-2)}$$

wobei die modifizierten M_{ij} sich nur auf den Potentialanteil zur Austauschwechselwirkung beziehen. Wir erhalten die neue Bewegungsgleichung

$$(T_r + \hat{V}_{opt} - E_r) \mid \chi \rangle = \sum_{i,j} \mid u_i \rangle \, \left(M_{ij} \langle u_i \mid (T_r - E_r) \mid u_j \rangle + \right.$$

$$\left. + M_{ij}^V \langle u_i \mid \hat{V}_{opt} \mid u_j \rangle \right) \langle u_j \mid \chi \rangle \quad . \qquad \text{(A IV-3)}$$

Es bleibt noch Forderung 3. zu erfüllen. Wir erreichen dies, indem wir vom Korrekturterm für die M_{ij} den entsprechenden Term für ein extrem langreichweitiges Potential abziehen:

$$M_{ij}^V = M_{ij} + (1 - M_{ij}) \left(\frac{\langle u_i | V_a | u_j \rangle}{\langle u_i | V_f | u_j \rangle} - \frac{\langle u_i | V_{a,l} | u_j \rangle}{\langle u_i | V_{f,l} | u_j \rangle} \right) \quad . \qquad \text{(A IV-4)}$$

Die neuen M_{ij}^V setzen wir wieder in (A IV-3) ein.

Die Verallgemeinerung des Ansatzes auf Nukleon-Nukleon-Kräfte mit Austauschmischung ist offensichtlich. Es sei noch vermerkt, daß wir im Startpotential nach (A IV-1) in der Nukleon-Nukleon-Kraft die Ersetzung (II-37)

$$P_r \to - P_\sigma P_\tau$$

durchführen können, ohne V_{start} zu ändern. Davon überzeugt man sich durch Vergleich der Definition (A I-4b) mit der eines Faltungspotentials.

Durch die hier vorgeschlagene Korrektur wird die Restwechselwirkung des Resonating Group-Modells natürlich nicht vollständig in V_{start} berücksichtigt. Zwar wird insbesondere der Beitrag einer Spin-Isospin-Austauschmischung in der Nukleon-Nukleon-Kraft besser berücksichtigt als im ursprünglichen optischen Fischgrätenmodell, doch Austauschmischungen, die zur Singulett-Triplett-Aufspaltung führen, werden in der nichtlokalen Wechselwirkung immer noch nicht besser berücksichtigt als im gewöhnlichen optischen Fischgrätenmodell. Die Korrektur hat jedoch den Vorteil, daß sie recht leicht durchzuführen ist, da der Ein-Teilchen-Austauschterm K_1 des Normkerns zur Berechnung der Eigenzustände und Eigenwerte ohnehin bekannt sein muß.

Den Zusammenhang zwischen den hier angestellten Überlegungen, die ja mit dem optischen Fischgrätenmodell ohne Korrelationen angestellt wurden, und dem optischen Fischgrätenmodell mit Korrelationen kann man herstellen, wenn man den Jastrow-Faktor entsprechend den Überlegungen in Kapitel II.5 näherungsweise als Summe von Zwei-Teilchen-"Potentialen" beschreibt. Um das Verfahren zu demonstrieren, wollen wir versuchen, mit den hier angestellten Überlegungen zu einer Näherung für den korrelierten Normkern zu kommen.

Dazu sehen wir J als das durch F^2 erzeugte Faltungspotential an und versuchen für die Matrixelemente $\langle \phi_1\phi_2 u_i | F \mathcal{A}'_{ext} F | \phi_1\phi_2 u_j \rangle$ die Näherung

$$\langle \phi_1\phi_2 u_i | F \mathcal{A}'_{ext} F | \phi_1\phi_2 u_j \rangle \approx M_{ij} \langle u_i | J | u_j \rangle + \qquad \text{(A IV-5)}$$

$$+ NN'(1 - M_{ij}) \langle u_i | j | u_j \rangle \left(\frac{\langle u_i | Q | u_j \rangle}{\langle u_i | j | u_j \rangle} - \frac{\langle u_i | V_{a,1} | u_j \rangle}{\langle u_i | V_{f,1} | u_j \rangle} \right).$$

Dabei sind Q und j definiert durch

$$Q(R',R'') = K_1(R',R'')\, h(|R'-R''|) \ ,$$

$$h(r) = f^2\left(\frac{N\,N'}{N+N'}\, r\right) - 1 \ , \qquad \text{(A IV-6)}$$

$$\langle u_i | j | u_j \rangle = \langle \phi_1\phi_2 u_i | (f^2_{11'} - 1) | \phi_1\phi_2 u_j \rangle \ .$$

Der erste Term in (A IV-5) entspricht erkenntlich einer Anwendung des gewöhnlichen Fischgrätenmodells ohne Restwechselwirkung, der zweite der hier besprochenen Korrektur. Die Ersetzung von J durch j im Korrekturterm ist wesentlich, da $f^2 - 1$ auch längerreichweitige Anteile enthält, so daß sich F^2 nicht mehr allzu gut durch eine Überlagerung von Zwei-Teilchen-Potentialen darstellen läßt.

Die Normkerneigenwerte des unkorrelierten Normkerns wurden durch die des Oszillatorgrenzfalls approximiert. Für ein α-Teilchen aus der Variationsrechnung /35/ weicht die innere Wellenfunktion auch für große Nukleon-Nukleon-Abstände vom Oszillator-Grenzfall ab, deshalb wurde ein Oszillator-α-Teilchen mit inneren Korrelationen gemäß Fall b) zum Vergleich der Näherung mit dem errechneten Normkern verwendet. Dies hat auch den Vorteil, daß unsere Näherung die Anzahl der redundanten Zustände im korrelierten Normkern richtig wiedergibt.

Als Beispiel wurde der α-α-Normkern für l = 0, 2, 4 berechnet. Eine Bestimmung des zweiten Anteils zum Korrekturterm ergab:

$$\frac{\langle u_i | V_{a,l} | u_j \rangle}{\langle u_i | V_{f,l} | u_j \rangle} = 1/16 \quad \langle u_{i_<} | K_l | u_{i_<} \rangle \ , \ i_< = \text{Min. } (i,j) \ . \qquad \text{(A IV-7)}$$

Zu der Berechnung von Q wurde h in eine Summe aus Gauß-Funktionen entwickelt; die Integrationen wurden analytisch mit Hilfe eines von H. Klar für die Untersuchungen /21/ entwickelten Unterprogrammpakets durchgeführt.

Ein Vergleich der Eigenwertspektren zeigt, daß die Näherung tatsächlich recht gut ist:

l	korr. Normkern	Näherung
0	1.00, 1.00, 0.22, -0.14	1.00, 1.00, 0.22, -0.15
2	1.01, 0.22, -0.12	1.00, 0.23, -0.13
4	0.22, -0.10	0.24, -0.11

Der Wert von 1.01 im korrelierten Normkern beruht natürlich auf numerischer Ungenauigkeit.

Eine Approximation des korrelierten Normkerns ohne den Korrekturterm ergab viel zu kleine Beträge für die negativen Eigenwerte; die Ähnlichkeit der Spektren beruht also tatsächlich auf der hier vorgeschlagenen Verfeinerung des optischen Fischgrätenmodells. Wie Abb. A IV-1 zeigt, werden durch die Näherung nicht nur die Eigenwerte, sondern auch die Eigenzustände des korrelierten Normkerns recht gut approximiert.

Unser Beispiel zeigt also, wie bei sorgfältiger Anwendung der hier vorgeschlagenen Korrekturen zum optischen Fischgrätenmodell wesentliche Eigenschaften von Operatoren, die nur durch komplizierte Faltungsrechnungen ermittelt werden können, bereits ohne Fitting vorhergesagt werden.

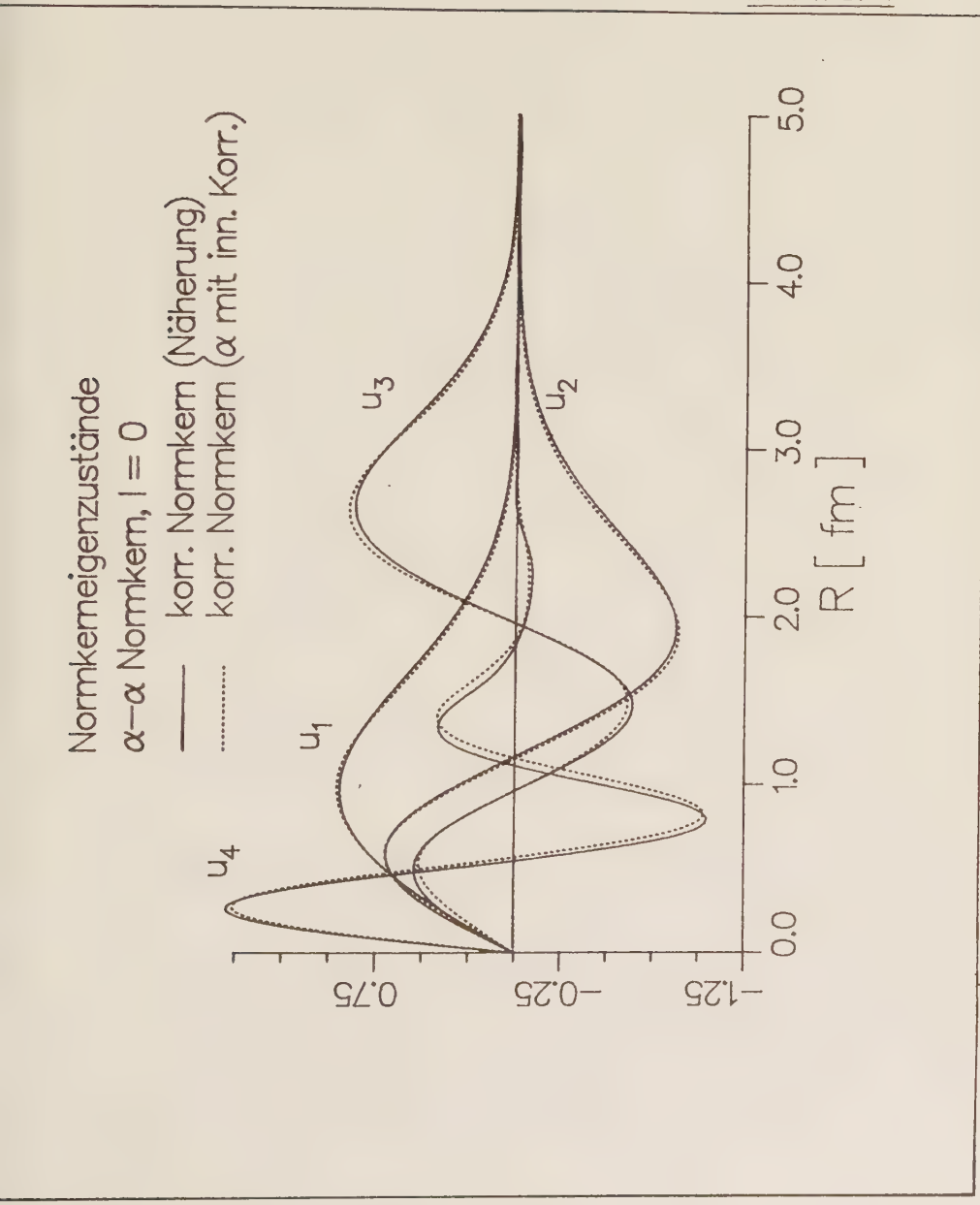

Normkerneigenzustände
α–α Normkern, l = 0
korr. Normkern (Näherung)
korr. Normkern (α mit inn. Korr.)
u4
u1
u3
u2
0.75
−0.25
−1.25
0.0
1.0
2.0
3.0
4.0
5.0
R [fm]

Abb. A IV-1

Literaturangaben

/1/ S. Ali, A.R. Bodmer, Nucl. Phys. 80, 99 (1966)

/2/ K. Wildermuth, T. Kanellopoulos, Nucl. Phys. 7, 150 (1958)

/3/ K. Wildermuth, Y.C. Tang, A Unified Theory of the Nucleus, Vieweg 1977

/4/ D.P. Thompson, I. Reichstein, W. McClure, Y.C. Tang, Phys. Rev. 185, 1351 (1969)

/5/ S. Saito, Progr. Theor. Phys. 41, 705 (1969)

/6/ E.W. Schmid, Z. Phys. A297, 105 (1980)

/7/ G. Spitz, K. Hahn, E.W. Schmid, Z. Phys. A303, 209 (1981)

/8/ E.W. Schmid, Y.C. Tang, K. Wildermuth, Phys. Lett. 7, 263 (1963)

/9/ H. Hutzelmeyer, H.H. Hackenbroich, Z. Phys 232, 356 (1970)

/10/ H. Stöwe, H.H. Hackenbroich, H. Hutzelmeyer, Z. Phys. 247, 95 (1971)

/11/ F. Dickmann, Seminarvortrag Kernphys. Seminar Tübingen 1983, preprint erscheint 1984

/12/ Y. Fujiwara, Y.C. Tang, Three-Cluster Resonating Group Method in The Coupled Channel Formalism, preprint 1983, eingereicht b. Phys. Lett. B

/13/ A. Tohsaki-Suzuki, M. Kamimura, K. Ikeda, Progr. Theor. Phys. Suppl. 68, 359 (1980)

/14/ E.W. Schmid, M. Orlowski, Bao Cheng-Guang, Z. Phys. A308, 237 (1982)

/15/ K. Wildermuth, W. McClure, Cluster Representations of Nuclei, Springer 1966

/16/ Y. Akaishi, S. Saito, H. Klar, S. Maeda, E.W. Schmid, G. Spitz, Two- and Three-Cluster Fish Bone Model with Saturation, Beitrag zur Konferenz "Few Body X", Karlsruhe 1983

/17/ S. Maeda, E.W. Schmid, erscheint in Z. Phys. A

/18/ E.W. Schmid, Progr. Theor. Phys. 65, 1447 (1981)

/19/ H. Horiuchi, Progr. Theor. Phys. Suppl. 62, 90 (1977)

/20/ K. Hahn, Dissertation Tübingen, 1983

/21/ H. Klar, Beitrag zur Vorkonferenz "Effective Interactions in Two- and Three-Cluster Systems", zitiert in /22/
H. Klar, Diplomarbeit, in Vorbereitung

/22/ E.W. Schmid, Bericht über die Vorkonferenz "Effective Interactions in Two- and Three-Cluster Systems", erscheint in Proceedings von "Few Body X"

/23/ Y. Akaishi, S. Saito, H. Klar, S. Maeda, E.W. Schmid, G. Spitz, in Vorbereitung

/24/ V.M. Krasnopol'sky, V. I. Kukulin, Yad. Fiz. 20, 883 (1974)

/25/ D.A. Zaikin, Nucl. Phys. A170, 584 (1971)

/26/ S. Saito, S. Okai, R. Tamagaki, M. Yasuno, Progr. Theor. Phys. 50, 1561 (1973)

/27/ T. Fliessbach, H. Walliser, Nucl. Phys. A377, 84 (1982)
H. Walliser, T. Fliessbach, Nucl. Phys. A394, 387 (1983)
A. Weiguny, Fizika 9, Supp. 3, 115 (1977)

/28/ H. Klar, persönliche Mitteilung

/29/ E.W. Schmid, Z. Phys. A302, 311 (1981)

/30/ E.W. Schmid, M. Orlowski, B. Cheng-Guang, Z. Phys. A308, 237 (1982), wie Ref. /14/

/31/ E.W. Schmid, Invited Talk bei "Few Body X", erscheint in den Konferenz-Proceedings

/32/ H. Tanaka, H. Nagata, Progr. Theor. Phys. Suppl. 56, 121 (1974)

/33/ E.P. Wigner, L. Eisenbud, Phys. Rev. 72, 29 (1949)
M. Kamimura, Progr. Theor. Phys. Suppl. 62, 236 (1977)

/34/ H. H. Robertson, Proc. Cambridge Phil. Soc. 52, 538 (1956)

/35/ Y.C. Tang, E.W. Schmid, R.C. Herndon, Nucl. Phys. 65, 203 (1965)

/36/ N. Austern, P. Iano, Nucl. Phys. 18, 672 (1960)

/37/ A. Fässler, F. Fernandez, G. Lübeck, K. Shimizu, Nucl. Phys. A402, 555 (1983)

/38/ V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, V.M. Krasnopol'sky, P.B. Sazonov, preprint 1983, einger. bei Phys. Lett. B

/39/ S.A. Afzal, A.A.Z. Ahmad, S. Ali, Rev. Mod. Phys. 41, 247 (1969)

/40/ W.S. Chien, R.E. Brown, Phys. Rev. C10, 1767 (1974)

/41/ F. Ajzenberg-Selove, Nucl. Phys. A320, 1 (1978)

/42/ I. Reichstein, Y.C. Tang, Nucl. Phys. A139, 144 (1969)
I. Reichstein, Y.C. Tang, Nucl. Phys. A158, 529 (1970)

- Der Unterschied zu /4/ lag hauptsächlich in der Einführung einer Nukleon-Nukleon-Kraft mit unterschiedlichen Reichweiteparametern für Singulett u. Triplett. Dadurch konnten die angesprochenen Probleme in beiden Streusystemen vermieden werden. -

/43/ R. Kircher, Dissertation Tübingen, 1981

/44/ J.E. Bond, F.W.K. Firk, Nucl. Phys. A287, 317 (1977)

Dank

An dieser Stelle möchte ich zunächst Herrn Prof. Erich Schmid danken, der das Thema für diese Arbeit vergeben hat. Durch sein nimmermüdes Interesse und viele gute Ratschläge und Anregungen hat er stets zu verhindern gewußt, daß ich mich in Sackgassen festrenne oder gar am Thema zu verzweifeln beginne.

Dank gebührt auch meinen Kollegen in der Arbeitsgruppe Schmid, Dr. Klaus Hahn, Dr. Roland Kircher, nicht zuletzt Dr. Shuji Maeda und vor allem Herrn Heinz Klar, die mich mit Ratschlägen, Anregungen und mancher Hilfestellung oft einen Schritt weitergebracht haben.

Ich möchte auch nicht versäumen, einigen Gästen unseres Instituts zu danken, die während ihres Aufenthalts Interesse an meiner Arbeit gezeigt haben. Zu nennen sind vor allem Prof. Akaishi und Prof. Saito, die mich mit einigen der hier verwendeten numerischen Verfahren vertraut gemacht haben, und auf die wesentliche Teile des verwendeten Formalismus zurückgehen, aber auch Prof. Tang für Beiträge zur Diskussion nach einem Vortrag über meine vorläufigen Ergebnisse.

Das Tippen des Manuskripts wäre ohne die Mithilfe von Regine Adler und Christl Kienle, die einige Abende ihrer Freizeit dafür geopfert haben, wohl schier endlos geworden; herzlichen Dank vor allem für die Bemühungen, meine Handschrift zu entziffern!

Es sei auch allen Mitarbeitern des Rechenzentrums gedankt, die sich darum bemühen, die vorhandene Rechenanlage vom Typ UNIVAC 1100/80 in Betrieb und für die Benutzer zugänglich zu halten, besonders Herrn Lothar Butsch, dem allzuoft die undankbare Aufgabe zukommt, als Puffer zwischen dem Computer und dessen unzufriedenen Benutzern zu dienen.

In meinen Computerprogrammen wurden für einige numerische Probleme Unterprogramme aus der NAG-Bibliothek, zum Plotten solche aus dem Paket DISSPLA verwendet.

Lebenslauf

Ich wurde am 11. 10. 1955 in Ulm/Donau geboren. Meine Eltern sind Eugen und Franziska Spitz. Kindheit und Jugend verbrachte ich in Vöhringen/Iller, wo ich von 1962 bis 1966 die Grundschule besuchte. Meine Gymnasialausbildung erhielt ich am Kolleg der Schulbrüder in Illertissen; dort legte ich im Juni 1975 die Abiturprüfung ab. Anschließend leistete ich 15 Monate Grundwehrdienst. Im Herbst 1976 immatrikulierte ich mich an der Universität Tübingen im Fach Physik. Die Diplomvorprüfung schloß ich am 11. 10. 1978 ab, das Diplom in Physik wurde mir am 17. 12. 1981 zuerkannt. Im Februar 1982 begann ich unter der Leitung von Prof. Erich Schmid am Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen meine Doktorarbeit, die im Januar 1984 abgeschlossen wurde. Im gleichen Zeitraum war ich auch als Angestellter für das Institut für Theoretische Physik tätig.

Vorlesungen, Seminare und Praktika habe ich bei folgenden Professoren oder sonst mit akademischer Ausbildung beauftragten Personen besucht:
Baumann, Becker, Dähn, Dittrich, Ebert, Elwert, Fäßler, Gönnenwein, Grewing, Grosser, Jacobson, Kasper, Kramer, Krüger, Lutz, Mack, Mertens, Möllenstedt, Oed, Pfister, Rujsenaars, E. Schmid, Schief, Schubring, Schwenk, Speidel, Staudt, Strähle, Stumpf, Temesvary, Wildermuth, A. Wolf .

Ich bin Mitautor der folgenden Veröffentlichungen:

The Role of Partly Pauli-Forbidden States in Nucleus-Nucleus Elastic Scattering, Z. Phys. A303, 209 (1981)

Two- and Three-Cluster Fish Bone Model With Saturation

The n-α and α-α Direct Potential in the Fish Bone Optical Model With Saturation

Die beiden letztgenannten Arbeiten sind Beiträge zur Konferenz "Few Body X", Karlsruhe 1983, und stehen derzeit nur als Vorabdruck für Konferenzteilnehmer zur Verfügung, da die Proceedings noch nicht erschienen sind.

Offsetdruck Spengler
Lessingstraße 4 · 7401 Neustetten 1
Telefon (0 74 72) 2 21 45